

Estudio de la dispersión de cianuro de hidrógeno empleando simulación Monte Carlo. Estimación de distancias seguras

Study of hydrogen cyanide dispersion using Monte Carlo simulation. Safety distances Estimation

Berenice Urquiza¹; Romina Kraft¹; Santiago Orellano¹

¹CAIMI, Centro de Aplicaciones Informáticas y Modelado en Ingeniería, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Rosario, Zeballos 1346, S2000BQA Rosario, Argentina.

berenedaianaurquiza@gmail.com; romina.kraft@hotmail.com;
santiago.orellano93@gmail.com

Resumen

La estimación de distancias de seguridad ante los distintos eventos accidentales plantea importantes retos debido principalmente al elevado número de variables estocásticas involucradas en los fenómenos. En este trabajo se presenta una metodología, que fue implementada mediante el desarrollo de un software para la determinación de distancias de seguridad considerando distintos niveles de afectación ante una eventual dispersión de cianuro de hidrógeno, gas liviano tóxico, provenientes de una fuente puntual. El modelado de la dispersión del tóxico se realiza mediante el empleo del modelo gaussiano y las variables estocásticas involucradas se abordan mediante el empleo del método Monte Carlo. A través de un análisis estadístico se definen los puntos donde se manifiestan concentraciones inferiores a los umbrales (AEGL) en el 90 % de los escenarios evaluados. Finalmente, se presentan las zonas de afectación considerando distintos caudales fugados de Cianuro de Hidrógeno (CNH) en los alrededores de la ciudad de Rosario.

Palabras Claves: Distancias de seguridad; Dispersión de tóxicos; Monte Carlo

Abstract

The estimation of safety distances for the different accidental events poses important challenges mainly due to the high number of stochastic variables involved in the phenomena. In this work, a methodology is presented, which was implemented through the development of a software for the determination of safety distances considering different levels of affectation in case of a possible dispersion of hydrogen cyanide, a toxic light gas. The toxic dispersion modeling is carried out using the Gaussian model and the stochastic variables are approached using the Monte Carlo method. Through a statistical analysis, the points where concentrations below the thresholds (AEGL) occur in 90% of the evaluated scenarios are defined. Finally, the affected areas are presented considering different leaked flows of Hydrogen Cyanide (CNH) in the surroundings of the Rosario city.

Keywords: Safety distances; Toxic dispersion; Monte Carlo

Introducción

La presencia de contaminantes en el aire conlleva un riesgo para la salud de las personas. Los diversos mecanismos de dispersión afectan los niveles de contaminantes a nivel del suelo. Este proceso depende de diversos factores, las condiciones meteorológicas, la altura de las fuentes emisoras, la topografía del terreno, el caudal emitido, entre otros.

Uno de los parámetros más importantes a la hora de planificar respuestas ante accidentes de envergadura, es la distancia de impacto de tales eventos. Para ello, el problema es que no existe a priori información acerca del escenario accidental (por ejemplo, los valores de los parámetros atmosféricos y de los caudales de fuga que provoca la dispersión del material analizado), ya que es un evento a futuro. El enfoque más realista implica calcular tales distancias en función de las frecuencias o distribuciones de probabilidad asociadas a los parámetros relevantes que describen el problema en cuestión (Athar et al., 2019).

A continuación, se presentará el método desarrollado aplicado a un caso particular, la dispersión de cianuro de hidrógeno (HCN) en aire. El mismo es líquido a temperaturas inferiores de 26°C. Se usa en la industria de la galvanoplastia, metalurgia, producción de compuestos orgánicos, manufactura de plásticos y algunos procesos de minería. Las soluciones de cianuro de hidrógeno se almacenan en áreas frescas y bien ventiladas. La alta exposición causa intoxicación, incluyendo dolor de cabeza, debilidad y latidos cardíacos fuertes que pueden llevar rápidamente a convulsiones y muerte (New Jersey Department of Health, 2011).

Metodología

La determinación de distancias de seguridad con significancia estadística dada la dispersión de un tóxico requiere de un tratamiento complejo. En este trabajo, se ha implementado una metodología materializada en una herramienta computacional desarrollada en Ms. Excel que permite determinar de manera rápida, distancias de seguridad en el caso de la fuga de cualquier gas liviano, en este caso en particular -HCN-. La metodología utilizada con el fin de determinar distancias de seguridad se fundamenta, o puede representarse a través de la figura 1.

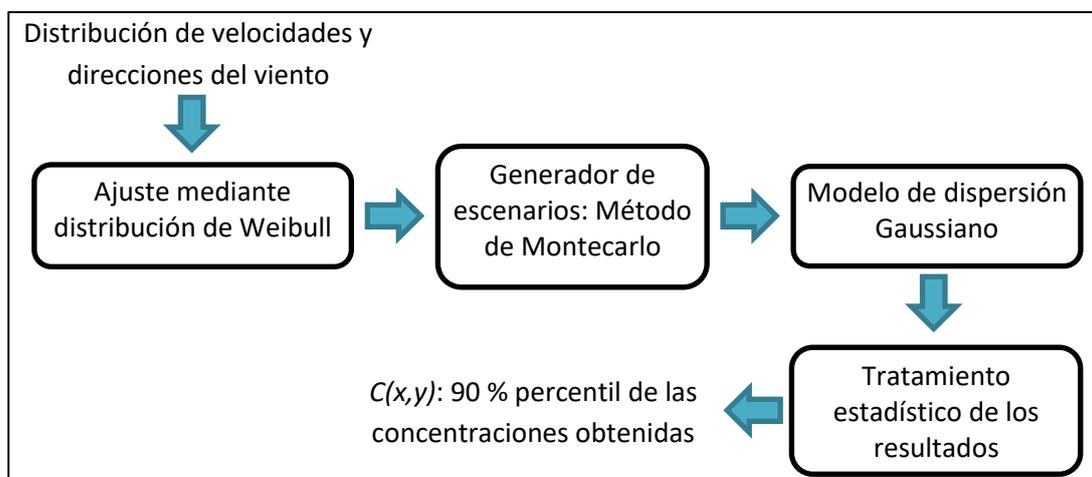


Figura 1. Metodología para la estimación de distancias de seguridad dada la dispersión de gases livianos

A partir de un relevamiento histórico de las direcciones y velocidades de viento presentes en los alrededores de la ciudad de Rosario, se realiza un ajuste para cada dirección mediante la distribución de Weibull (considerada la más idónea). Luego de obtener los parámetros de dicha distribución, se aplicó el método de Montecarlo permitiendo definir un conjunto de escenarios a evaluar (Shokofe R., 2021). Esos escenarios se simularon mediante la implementación del Modelo de Dispersión Gaussiano. Los resultados obtenidos fueron almacenados y para cada punto situado a una distancia r de la ubicación de la fuga en la dirección del viento α , se construyeron histogramas y se determinaron las concentraciones que superan al 90 % de la frecuencia acumulada para cada escenario evaluado. Finalmente, se determinaron las distancias en cada dirección donde se manifiestan las concentraciones correspondientes a distintos valores umbrales de exposición reconocidos internacionalmente.

A continuación, serán desarrollados con mayor detalle los bloques presentados en la figura 1.

Relevamiento de las condiciones atmosféricas

Las variables ambientales más influyentes en la dispersión de un gas liviano son la dirección y velocidad del viento, y la estabilidad atmosférica. La última puede determinarse en función de las dos primeras y la intensidad de radiación incidente. Si se considera como una variable binaria que indique 1 si la dispersión ocurre de día y 0 si acontece de noche, la estabilidad atmosférica puede definirse, sin incurrir en una sobreestimación significativa, solamente considerando la modificación de las características del viento. A partir de la base de datos de direcciones y velocidades de viento disponibles en la página meteoblue, se extrajo la información reportada en la rosa de los vientos presentada en la figura 2.

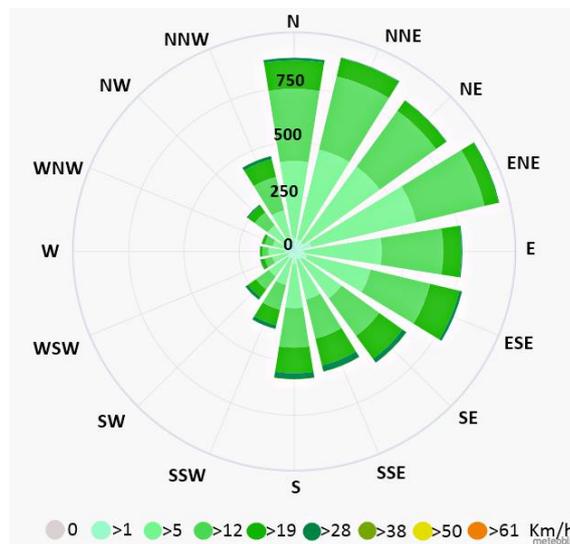


Figura 2. Rosa de los vientos con el número de horas al año que el viento sopla en la dirección indicada
Fuente www.meteoblue.com

En base a la información extraída, se estimaron los parámetros (α y β) de la distribución de Weibull para la velocidad de viento en cada una de las direcciones. Ésta distribución de probabilidad fue seleccionada dado que concuerda con la evaluación de los datos observados. Se dice que una variable aleatoria X tiene una distribución Weibull con parámetros α y β ($\alpha > 0$, $\beta > 0$) si la función de densidad de probabilidad de X se corresponde con la Ec. 1 (Devore, 2012).

$$f(x; \alpha, \beta) = \frac{\alpha}{\beta^\alpha} x^{\alpha-1} e^{-(x/\beta)^\alpha} \quad x \geq 0 \quad (1a)$$

$$f(x; \alpha, \beta) = 0 \quad x < 0 \quad (1b)$$

Método de Montecarlo

El método de Montecarlo es un método estadístico numérico, usado para aproximar expresiones matemáticas complejas y costosas de evaluar con exactitud.

La naturaleza aleatoria de la estimación de la distancia de seguridad se aborda mediante la utilización de dicho método. Operativamente, para evaluar la variable estocástica velocidad del viento, se generan números aleatorios de 0 a 1 considerando 100 escenarios por cada una de las 16 direcciones de viento estudiadas, determinando la velocidad mediante la implementación de la inversa de la distribución de Weibull.

Una vez determinados dichos valores, para cada escenario, se calcula la concentración del tóxico en función de las coordenadas espaciales mediante el modelo de dispersión Gaussiano que se presenta a continuación.

Modelo de Dispersión Gaussiano

El modelo de dispersión Gaussiano de gases livianos utilizado se fundamenta a partir del siguiente conjunto de hipótesis: el contaminante es liberado a la atmósfera en forma continua desde una fuente puntual con un caudal (Q [g/s]) constante; se considera que el viento es estacionario y con una velocidad uniforme ($u \neq u(x,y,z,t)$ [m/s]). Bajo estas hipótesis, las ecuaciones de variación para la transferencia de masa pueden simplificarse, e integrarse, obteniéndose la Ec. 2.

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left\{ \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\} \quad (2)$$

Donde, C es la concentración del contaminante [g/m³]; σ_y y σ_z representan los coeficientes de dispersión (desviaciones típicas asociadas a las gaussianas) que pueden estimarse en función de la estabilidad atmosférica y la distancia desde la fuente. H representa la altura efectiva de la fuente. En la figura 3 puede observarse la descripción del fenómeno de dispersión de un contaminante liviano considerando este modelo.

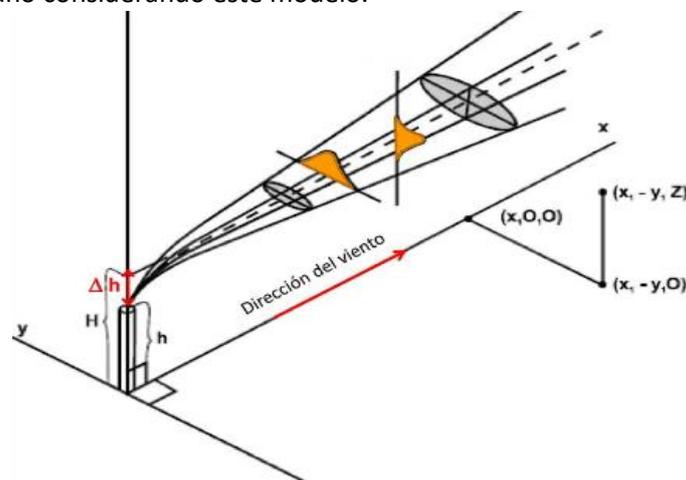


Figura 3. Modelo de dispersión gaussiana (Jerez, 2007)

Tratamiento estadístico de los resultados

Se procede a la discretización del espacio (inmediaciones de la ubicación de la fuente puntual considerada), adoptando un $\Delta x, \Delta y$ igual a 300 m, obteniendo una grilla de puntos de 40 x 40. Para cada punto espacial (x,y) se calculó la concentración asociada a cada uno de los 100 escenarios evaluados por dirección de viento, obteniendo una distribución de concentraciones. De esa distribución, se estima la concentración con un 90% de confianza asumiendo que dicho valor caracteriza al punto espacial (x,y) en cuestión.

Finalmente, se determinan la distancia en la dirección del viento -r- donde se alcanzan las concentraciones asociadas a ciertos umbrales de exposición en función de la posición relativa del punto y del sitio de la fuga.

Se presenta a continuación un caso de estudio para ejemplificar la aplicación de la metodología desarrollada.

Caso de estudio

Se considera como escenario accidental: la falla de la válvula de seguridad (2,5 cm de diámetro) de un tanque (65 m³) que contiene cianuro de hidrógeno presurizado con un nivel de líquido de 81%. Se procede a simular dicho escenario en el software ALOHA desarrollado por la EPA (Environmental Protection Agency), con el objetivo de obtener el caudal fugado a la atmósfera (evaporación del charco generado durante el derrame).

Para determinar las distancias de seguridad se utilizaron los límites de exposición AEGL (Acute Exposure Guideline Level), ya que es uno de los criterios más empleados al momento de desarrollar planes de respuesta (índices de toxicidad de emergencia). Los niveles de referencia de exposición aguda establecen niveles de concentración química que representan un nivel definido de riesgo para las personas (Firestation, 2013). Para el cianuro de hidrógeno, considerando un tiempo de exposición de 60 minutos, los AEGL adoptan los siguientes valores:

AEGL-1: 0.00221 g/m³; AEGL-2: 0.00784 g/m³ y AEGL-3: 0.01655 g/m³

A continuación, se presentan los resultados obtenidos mediante la implementación de la metodología descripta.

Resultados

Mediante la implementación del modelo se logró obtener las curvas de iso-concentración correspondientes a los niveles AEGL con un 90% de confianza.

En las figuras 4, 5 y 6 se presentan las zonas de riesgo ante la dispersión accidental de dicha sustancia obteniéndose tres diagramas presentando la dispersión de cianuro de hidrógeno con respecto a las siguientes tasas de evaporación: tasa mínima (8 kg/min), tasa media (13,4 kg/min) y tasa máxima (18,8 kg/min), evidenciando cada nivel de riesgo de acuerdo a los índices de AEGLs para las distancias evaluadas en cada dirección de viento.

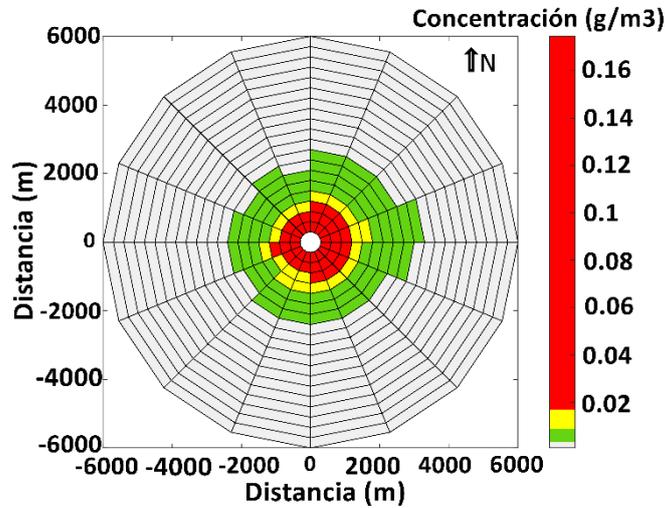


Figura 4. Tasa mínima de evaporación (8 kg/min)

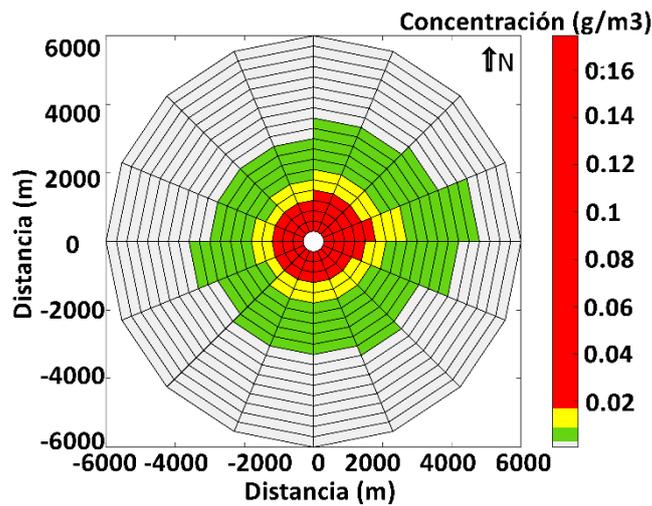


Figura 5. Tasa media de evaporación (13,4 kg/min)

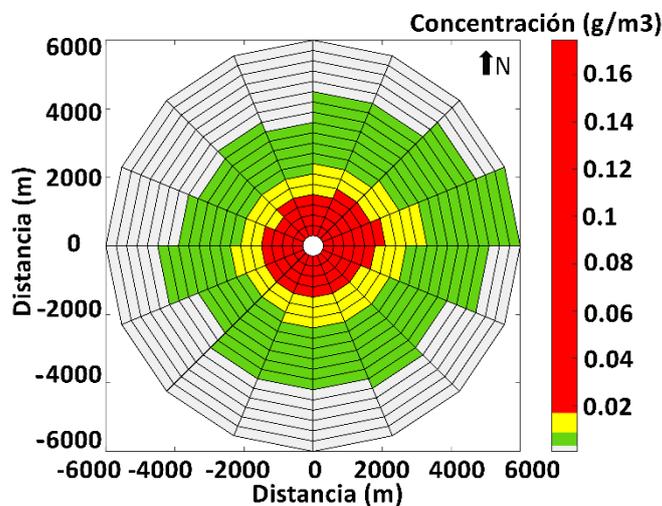


Figura 6. Tasa máxima de evaporación (18,8 kg/min)

Lógicamente, mientras mayor sea el caudal fugado, tanto mayor será la distancia de seguridad. Obteniéndose distancias de hasta 6 km desde la fuente donde se manifiesta el nivel de AEGL-1 para el máximo caudal evaluado. A partir de las figuras, puede observarse una elevada variabilidad de la distancia de seguridad con respecto a la posición relativa entre la fuente y el punto receptor. De hecho, si se observan las figuras, la distancia en la dirección SOO (112,5° a 135° evaluado desde el norte) representa aproximadamente un 60 % de la distancia de seguridad estimada en la dirección E (270° a 293°). Claramente, estas distancias dependerán de la rosa de los vientos característicos de la zona evaluada.

Conclusiones

El modelo de dispersión atmosférica generado es una herramienta que puede aplicarse no sólo para obtener distancias de seguridad de cianuro de hidrógeno, sino también para cualquier otro gas liviano que se emita al ambiente. El cálculo de distancias de seguridad ante accidentes de esta magnitud es indispensable para disponer de datos anticipados de los efectos de la dispersión de contaminantes gaseosos, lo que supone para las industrias un poderoso elemento con el fin de anticiparse y establecer acciones correctivas que eviten posibles accidentes, como así también la correcta elaboración planes de evacuación de personal operativo.

En futuros trabajos, se incorporarán mediante el método de Montecarlo, las variables estocásticas no consideradas hasta aquí. Entre ellas la altura de nivel de líquido en el tanque y el diámetro de agujero, usando funciones de densidad de probabilidad para estas. El desarrollo de tal herramienta considerando toda la cadena estocástica representa una herramienta extremadamente valiosa desde el punto de vista de la gestión del riesgo.

Reconocimientos

Este trabajo fue realizado en el marco del proyecto UTI5217TC “Estrategias de Modelado de Procesos bajo la Filosofía de Diseño Inherentemente Seguro” en el Centro de Aplicaciones Informáticas y Modelado en Ingeniería (CAIMI), de la UTN-Rosario.

Referencias

- Athar et al., 2019. Inherent safety for sustainable process design of process piping at the preliminary design stage. *J. Clean. Prod.*, 209
- Devore, J., 2012. *Probability and Statistics for Engineering and the Sciences.*, 8th Edition. ed. Brooks/Cole Cengage Learning, Boston, USA.
- Firestation, 2013. Indices de toxicidad en emergencias AEGL (Acute Exposure Guideline Levels).
- Godoy, S.M., 2012. Tesis de doctorado en ingeniería mencion química. *Dispersión Sust. Peligrosas En Aire Metodol. Para Determinación Riesgo Distancias Interv. Ante Escen. Accid. Estocásticos 1st*, 262.
- Jerez, A.T., 2007. Aplicación práctica del modelo de dispersión de contaminantes atmosféricos 35.
- New Jersey Department of Health, 2011. cianuro de hidrógeno 6.
- Shokofe R., 2021. Investigating the impact of gas emission uncertainty on airflow distribution in an auxiliary ventilation system using CFD and Monte-Carlo simulation.
- www.meteoblue.com, n.d. Datos climáticos y meteorológicos históricos simulados para Rosario.