

Simulación de la evaporación de un charco de ciclohexano utilizando Scilab. Evaluación de las variables más influyentes.

Simulation of the evaporation of a cyclohexane pool using Scilab. Evaluation of the most influential variables.

Francisco Fossati, Romina Kraft, Santiago Orellano

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

fossati.francisco98@gmail.com; romina.kraft@hotmail.com; santiago.orellano93@gmail.com

Resumen

El crecimiento del número de instalaciones industriales de gran porte incide sobre la cantidad de accidentes tecnológicos registrados. El derrame de una sustancia volátil puede desencadenar diferentes eventos no deseados de acuerdo a las condiciones de entorno, uno de ellos la evaporación y formación de nubes tóxicas/inflamables y/o explosivas. En este trabajo, se implementa un modelo riguroso para el estudio de la expansión y evaporación del charco formado por un derrame de ciclohexano, con el objetivo de evaluar y determinar las variables más influyentes en el cálculo de la tasa evaporada; el modelo utilizado es "Gas Accumulation Over Spreading Pools" (GASP) al cual se lo complementa con balances de energía. Mediante la consideración de diferentes escenarios accidentales, se infiere la importante incidencia de la velocidad de viento secundada por la temperatura del suelo. Al mismo tiempo, como era de esperarse un importante factor en el problema es el caudal fugado, observándose una elevada emisión a la atmósfera.

Palabras claves Evaporación de charco, Ciclohexano, Tasa de evaporación.

Abstract

The growth on the number of large industrial facilities has an impact on the number of technological accidents recorded. The spill of a volatile substance can trigger different undesired events according to the environmental conditions, one of them being the evaporation and formation of toxic/flammable and/or explosive clouds. In this work, a rigorous model to study the expansion and evaporation of the pool formed by a cyclohexane spill is implemented, with the aim of evaluating and determining the most influential variables on the calculation of the evaporation rate; the model used is "gas Accumulation Over Spreading Pools" (GASP) which is complemented by energy balances. Through the consideration of different accidental scenarios, the important incidence of the wind speed endorsed by the soil temperature is deduced. At the same time, as expected, an important factor in the problem is the leakage rate, noting a high emission to the atmosphere.

Keywords Pool evaporation, Cyclohexane, Evaporation rate.

Introducción

El almacenamiento de una sustancia volátil y el peligro asociado a su exposición a la atmósfera es de importancia al momento de efectuar un análisis de riesgo cuantitativo (ACR) en la industria. Si ocurre un derrame de este tipo de sustancias, en ausencia de una fuente de ignición, generará vapores con la consecuente posibilidad de formación de nubes tóxicas/inflamables y/o explosivas pudiendo ocasionar graves consecuencias no sólo dentro de la planta sino también en las cercanías.

Por dichas razones, se persigue el estudio de los modelos matemáticos que permiten anticipar el comportamiento de un charco de una sustancia volátil, evaluar la contribución de los distintos mecanismos de transferencia de calor y estimar la tasa de evaporación; para luego seleccionar uno, corroborarlo y poder utilizarlo. En este ámbito, existen tanto modelos simplificados como modelos más complejos. Si bien, los primeros presentan ventajas en cuanto a su implementación, se ha comprobado que no se ajustan satisfactoriamente a los datos experimentales disponibles. En cuanto a los modelos más rigurosos: LPOOL, SUPERCHEMS y GASP; la selección del más adecuado implica considerar diferentes aspectos del modelo en sí como su disponibilidad, su campo de aplicación (tipo de superficies: suelo liso o rugoso, agua; líquidos saturados – temperatura normal de ebullición por debajo de la temperatura ambiente- o no) y la idoneidad de las hipótesis adoptadas (transferencia de calor: incidencia de todas las fuentes del entorno, expansión del charco basada en el modelo de capa profunda), entre otros aspectos (TNO, 2005).

El presente trabajo busca implementar un modelo riguroso para el estudio de la expansión y evaporación de un charco producto del derrame de ciclohexano, con el objetivo de evaluar y determinar las variables más influyentes en el cálculo de la masa evaporada; el modelo utilizado es “Gas Accumulation Over Spreading Pools” (GASP), el cual debe ser complementado con balances de energía que incluyan los fenómenos de conducción, convección y radiación.

Metodología

Se considera en este trabajo, que GASP “Gas Accumulation over Spreading Pools”, es el modelo más adecuado para analizar, dado que incorpora todos los componentes de la transferencia de masa y energía, resolviendo el conjunto de ecuaciones basándose en un balance de energía completo; aplicable a la expansión del charco tanto en superficies sólidas como en el agua. La transferencia de masa del modelo se basa en el trabajo de Brighton (Brighton, 1985). No es apto para sustancias volátiles solubles en agua y líquidos hirvientes más densos que el agua.

Particularmente se estudia el derrame de ciclohexano almacenado a temperatura ambiente sobre una superficie sólida: concreto. Se considera que la evolución del charco puede ocurrir en régimen turbulento / laminar o pasar por ambos a lo largo de la dinámica de la expansión. Al mismo tiempo, se evalúa que dicha expansión no se encuentre limitada por endicamientos de manera tal de poder visualizar cual sería el área total del charco sin este tipo de instalaciones (peor escenario). Por otra parte, se desea contemplar la influencia de las condiciones ambientales para estimar las diferentes formas de transferencia de calor, situando el evento accidental en la zona del gran Rosario.

Descripción del modelo seleccionado – GASP

Expansión del charco: descarga y evaporación

Las variaciones en el volumen acumulado de líquido en el charco V [m³] pueden describirse a partir de:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{dV_d}{dt} - \frac{dV_e}{dt} - \frac{q_{dr}}{\rho_L} \quad (1)$$

El drenaje q_{dr} [kg/s] tiene en cuenta la pérdida de líquido a través de los poros del suelo. En este caso es un suelo no poroso, por tanto ($q_{dr}=0$) (Afzali, 2021). El volumen de descarga V_d [m³] al charco se calcula a partir de:

$$\frac{dV_d}{dt} = \frac{q_s}{\rho_L(T)} \quad (2)$$

Representando q_s [kg/s] el caudal derramado y ρ_L [kg/m³] la densidad del líquido. Al mismo tiempo, el volumen evaporado V_e [m³] se estima como:

$$\frac{dV_e}{dt} = \frac{q_v}{\rho_L} \cdot A_{top} \quad (3)$$

Siendo q_v [kg/ m² s] la tasa de evaporación por unidad de área y A_{top} [m²] el área expuesta del charco. Esta última se estima definiendo el factor s , el cual es la relación entre la profundidad que se presenta en el borde del charco h_f [m] y profundidad media h [m], y el balance de fuerzas viscosas e inerciales considerado por la función $j(s)$, de acuerdo a lo presentado a continuación: $s = \frac{hf}{h} hf \rightarrow$

Balance de fuerzas viscosas e inerciales

$$j(s) = 1 \quad \text{si } s > 2 \quad (4a)$$

$$j(s) = 2s \quad \text{si } s < 2 \quad (4b)$$

$$A_{top} = j(s) A \quad (5)$$

Siendo A [m²] el área calculada a partir r [m], radio del charco.

Expansión de charco

La variación del radio r [m] de un charco en expansión sobre una superficie sólida, se describe como:

$$\frac{dr}{dt} = \phi_r \cdot u \quad (6)$$

Donde u [m/s] es la velocidad de expansión y ϕ_r es un factor que considera la dinámica de la expansión de charco sobre una superficie de rugosidad z_{ra} [m], de acuerdo a:

$$\phi_r = 1 - \frac{g z_{ra}}{4 u^2} \left(\sqrt{1 + \frac{8 u^2}{g z_{ra}}} - 1 \right) \quad (7)$$

El balance de fuerzas resultante en el charco para estimar la velocidad de expansión u , donde $\gamma(s)$ es un coeficiente adimensional que considera las fuerzas gravitacionales, se expresa de acuerdo a la ecuación:

$$\frac{du}{dt} = \gamma(s) \frac{4 g h}{r} - C_F \quad (8)$$

$$\gamma(s) = 1 - s \quad \text{si } s < 2 \quad (9a)$$

$$\gamma(s) = -\frac{s^2}{4} \quad \text{si } s > 2 \quad (9b)$$

Por otro lado, C_F [m/s²] representa el fenómeno de fricción ya sea en régimen turbulento o viscoso. La resistencia para flujo laminar será modelada como:

$$C_{FL} = 2,53 \cdot j(s)^2 \cdot \left(\frac{C_{fl} v_L u}{h^2} (1 - f) \right) \quad (10)$$

Siendo v_L [m²/s] la viscosidad cinemática del líquido, C_{fl} un factor determinado por el perfil de velocidad vertical del charco (para superficies sólidas $C_{fl}=3$), f un factor que permite el movimiento radial de agua bajo el charco (para superficies sólidas $f=0$).

Por otro lado, la resistencia para flujo turbulento es:

$$C_{FT} = 4,49 \cdot j(s) \cdot \left(C_{ft} \frac{u^2}{h} \right) \quad (11)$$

Siendo C_{ft} el coeficiente de fricción turbulento (el valor optimo es $C_{ft}=0,0015$)

Finalmente, el factor de resistencia será:

$$C_F = \text{sign}(u) \max(C_{FL}; C_{FT}) \quad (12)$$

Evaporación: Transporte de vapor

El coeficiente de transferencia de masa k_m [m/s] a partir de la correlación de Kawamura-Mackay es:

$$k_m = 0,004786 u_w^{0,78} (2r)^{-0,11} Sc^{-0,67} \quad (13)$$

Siendo la velocidad del viento u_w [m/s] y Sc el número de Schmidt. A partir de este coeficiente es posible calcular la tasa de evaporación por unidad de área q_v [kg/m²s] necesaria para estimar el volumen evaporado, de acuerdo a:

$$q_v = k_m \rho_v \quad (14)$$

Balace de energía

Temperatura de charco

$$\frac{dT}{dt} = \frac{A_{top}}{C_{p,L}(T)\rho_L(T)V} (H(T) - q_v L_v(T)) + \frac{q_s}{\rho_L(T)V} (T_{qs} - T) \quad (15)$$

Siendo C_{pL} [J/kg K] el calor específico del líquido, H [J/m² s] la densidad de flujo de calor intercambiado con el entorno, L_v [J/kg] el calor latente de vaporización, T [K] la temperatura promedio del charco y T_{qs} [K] la temperatura de descarga.

A continuación, se presentan las ecuaciones pertenecientes a las distintas formas de transferencia de energía con el entorno:

Calor por conducción: concreto – charco

$$H_{C(t)} = \frac{k_s(T_s - T)}{\sqrt{a_s \pi t}} \quad (16)$$

Calor por convección: aire – charco

$$H_{a(t)} = \frac{0,037 Pr_a^{1/3} Re_a^{0,8} k_a}{2r} (T_a - T) \quad (17)$$

Calor por radiación

$$H_r = \frac{(1 - e)H_{rs} + C_3 T_a^6 - \sigma T_a^4 + C_4 N}{1,12} \quad (18)$$

Siendo k_s [J/m s K], a_s [m²/s] y T_s [K] la conductividad térmica, la difusividad térmica y la temperatura del suelo respectivamente; k_a [J/m s K] y T_a [K] la conductividad térmica y la temperatura del aire; H_{rs} la radiación solar recibida (dato brindado por el Servicio Meteorológico Nacional), e la emisividad del concreto igual a 0,4 $C_3=5,31 \cdot 10^{-13}$ [J/m² s K⁶], $\sigma=5,67 \cdot 10^{-8}$ [J/m² s K⁴], $C_4=60$ [J/m² s] y el porcentaje de nubosidad $N=0,5$.

Implementación del Modelo Seleccionado

El modelo descrito se implementó en el software SciLab, mediante la discretización de las ecuaciones diferenciales empleando el método de Euler, tomando un rango de la variable tiempo comprendido entre 0 y 10000 s con un incremento muy pequeño $dt=0.1$ s.

Se definieron valores iniciales adecuados para las siguientes variables: radio inicial $r_1=0.1$ m, profundidad media del charco $h_1=0.01$ m, velocidad de expansión $u_1=0.01$ m/s y la temperatura inicial de descarga del líquido T_f = temperatura del aire adoptada.

Definición de los escenarios evaluados

Como eje principal se tiene un tanque atmosférico de ciclohexano sin endicamiento, se considera la posibilidad de derrame sobre una superficie de concreto.

Para evaluar la tasa de evaporación, se parametriza el caudal fugado en 4 valores: 50, 100, 250 y 500 kg/s y la velocidad del viento en 3 cubriendo el rango de velocidades de viento de la zona: 2, 5 y 8 m/s.

Con respecto al balance de energía, se contemplaron dos situaciones antagónicas: Invierno - temperatura del suelo $T_s = 283,15$ K, temperatura del aire $T_a = 278,15$ K y radiación solar incidente $H_{rs} = 166$ J/ m² s; Verano - $T_s = 313,15$ K, $T_a = 303,15$ K y $H_{rs} = 625$ J/ m² s.

Resultados

En una primera evaluación se decide analizar la dependencia de los distintos tipos de mecanismos de transferencia de calor al cambio de condiciones ambientales para las condiciones verano – invierno ya definidas, considerando: una velocidad de viento media igual a 5 m/s y un caudal de entrada al charco constante e igual a 100 kg/s. De esta forma, se obtiene en la Figura 1 (a) la densidad de flujo de calor transferido por cada mecanismo en función del tiempo y en la Figura 1 (b) el calor total transferido, es decir considerando la evolución del área del charco expuesta al intercambio.

Puede observarse que la densidad de flujo de calor intercambiado con el suelo disminuye con el tiempo esto se debe al decremento del gradiente de temperatura. A pesar de esto, el calor total intercambiado por conducción con el suelo aumenta por el crecimiento del área de intercambio. Al mismo tiempo, la disminución de la temperatura del charco, implica un aumento en la densidad de flujo de calor por convección.

El aporte relativo de los tres mecanismos de transporte varía en función de la estación del año en que se produzca la fuga. Para intervalos de tiempos cortos, el intercambio de calor por conducción con el suelo es preponderante. Según las estimaciones del modelo, y con las temperaturas adoptadas para la caracterización de las estaciones, este tiempo donde la transferencia de calor por conducción prevalece frente a las demás es de 1 o 2 minutos en verano y más de 40 minutos en invierno.

Es importante acompañar dicho análisis con los resultados obtenidos para la masa total evaporada en función del tiempo. Es por ello, que en la Figura 1 (c) se presenta la evolución de tal variable considerando las dos condiciones antagónicas y analizando el aporte del volumen de descarga contemplando los diferentes caudales de fuga especificados anteriormente 50, 100, 250 y 500 kg/s. Se observa, como es de esperarse, una mayor emisión a la atmósfera de dicho contaminante para mayores caudales dado el incremento de área expuesta al intercambio de calor. Al mismo tiempo por lo detallado anteriormente se tiene que dado la superioridad de la densidad de flujo de calor en las condiciones de verano, tal escenario incrementa en gran medida la masa evaporada. Dicha situación se cumple siempre y cuando la cantidad de masa expuesta al entorno sea suficiente, por ejemplo, se observa el caso contrario para un caudal de 50 kg/s en verano y un caudal de 500 kg/s en invierno resultando en un incremento en la masa total evaporada en condiciones invernales. Esto se debe a que en el verano se tiene un caudal de descarga muy inferior generando un área expuesta tan reducida que por más que la fuerza impulsora para la transferencia de calor sea mayor, no alcanza a contrarrestar la falta de área disponible para dicha transferencia.

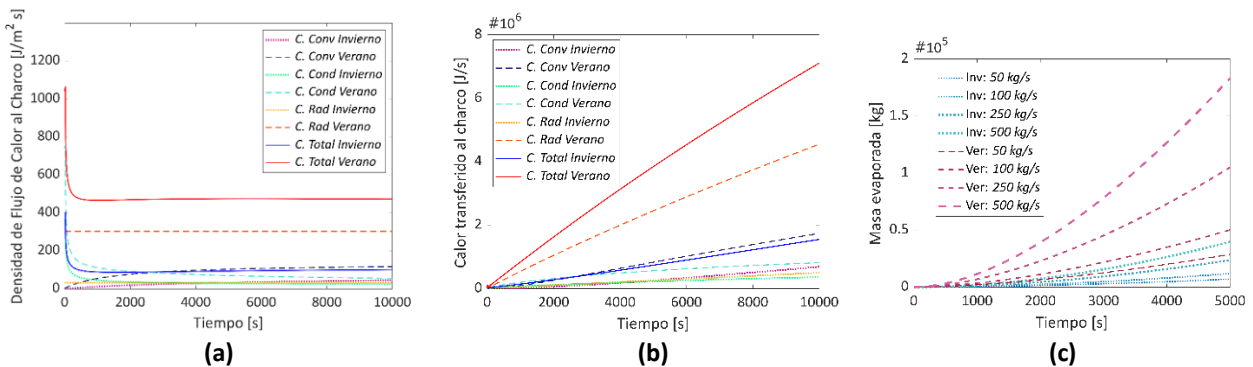


Figura 2. (a) Comparación entre invierno y verano de los mecanismos de transferencia de calor considerando la evolución del charco en el tiempo. (b) Calor total transferido al charco considerando la evolución del charco en el tiempo. (c) Masa de ciclohexano evaporada en función del tiempo y las condiciones del entorno.

Por otro lado, una variable que incide significativamente en la cantidad de masa evaporada es la velocidad de viento, dado que a mayor velocidad se garantiza la renovación de aire - concentraciones nulas o bajas de ciclohexano -, manteniendo el gradiente de potencial químico que continúa asegurando la transferencia de materia desde la fase líquida a la fase vapor. Con el objetivo de observar tal influencia, se presenta a continuación en la Figura 2 la tasa de evaporación en función del radio alcanzado en la expansión y la temperatura del charco para los distintos caudales estudiados y las condiciones de entorno presentes en verano, contemplando tres velocidades de viento: 2, 5 y 8 m/s.

De dicha gráfica, se desprende que a mayor velocidad de viento el área del charco (radio) disminuye dado el aumento de masa evaporada, al mismo tiempo que también decrece la temperatura de éste debido al incremento del flujo de calor necesario para causar dicha evaporación, necesariamente debe presentarse un aumento en el gradiente de temperatura tanto en la transferencia de calor convectiva, como por el mecanismo de conducción. Por otra parte, se observa que tal disminución es más marcada para caudales de fuga menores, esto se debe a que el volumen de descarga al charco se encuentra a temperatura constante e igual a la temperatura ambiente, un aporte menor de esta variable influye claramente en la temperatura media del charco.

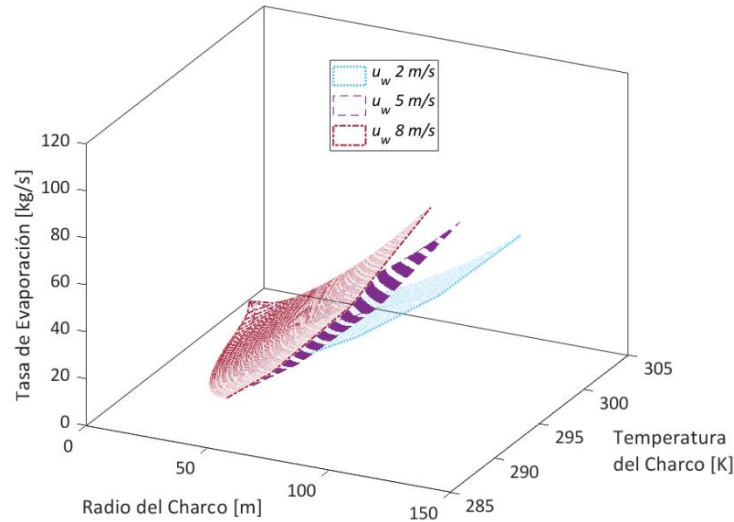


Figura 2-<. Tasa de evaporación para diferentes velocidades de viento en verano.

Conclusiones

Por medio del análisis efectuado en este trabajo para el derrame de ciclohexano en ausencia de una fuente de ignición, se expone la influencia de distintas variables en el fenómeno de evaporación de charco partiendo de diferentes condiciones de entorno. Se concluye la importancia de la evaluación de las condiciones ambientales: principalmente de la velocidad de viento secundada por la temperatura del suelo (aporte significativo por el mecanismo de conducción). Al mismo tiempo, aunque se remarca la simplificación adoptada de considerar un caudal constante de descarga a lo largo de la evolución del charco como así también la ausencia de delimitaciones del mismo, se infiere que éste, al menos en los primeros minutos, tiene gran influencia en la tasa de evaporación. Finalmente, se desea resaltar que la sustancia evaluada se considera no sólo inflamable sino también explosiva, por lo que contar con un análisis de las principales variables permite plantear a futuro un modelo simplificado con el fin de calcular la tasa de evaporación junto a un modelo de dispersión para estimar las consecuencias ocasionadas por un fognazo o una explosión de nube de vapor.

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.

Bibliografía

- Afzali, M., 2021. Modeling of evaporation of hydrogen during accidental releases. Faculty of Technology, Natural sciences and Maritime Sciences - University of South-Eastern Norway, Norway.
- TNO, 2005. Methods for the Calculation of Physical Effects - due to releases of hazardous materials (liquids and gases)- “Yellow Book”: CPR 14E, 3rd ed. ed. Committe for the Prevention of Disasters, The Hague.
- Brighton, P. W. M., 1985. Evaporation from a Plane Liquid Surface into a Turbulent Boundary Layer. J. Fluid Mech. SRD/HSE-report R375.