

01177



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE INGENIERIA
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO

5
24

DEPARTAMENTO DE INGENIERIA AMBIENTAL.

“ MODELO PARA EL CALCULO DE EMISIONES A LA ATMOSFERA PRODUCIDAS POR VAPORIZACION DE SUSTANCIAS PELIGROSAS ”

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN INGENIERIA AMBIENTAL

P R E S E N T A :

LUIS MIGUEL RIVERA CHAVEZ

DIRECTOR DE TESIS:

M. en C. VICENTE FUENTES GEA



MEXICO, D. E.

1995

FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AVENIDA DE
MEXICO

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO
FACULTAD DE INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA AMBIENTAL

M.en I. ABEL HERRERA CAMACHO
Encargado de la DEFFI-UNAM.
P R E S E N T E .

Me permito comunicarle que, a petición del alumno LUIS MIGUEL RIVERA CHAVEZ, he aceptado dirigir su tesis para obtener el grado de Maestro en Ingeniería Ambiental en la División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería. El trabajo que desarrollará tiene el título de "MODELO PARA EL CALCULO DE EMISIONES A LA ATMOSFERA PRODUCIDAS POR VAPORIZACION DE SUSTANCIAS PELIGROSAS".

Sin más por el momento y en espera de que la presente le permita al interesado continuar con los trámites previos al examen de grado, quedo de usted.

A T E N T A M E N T E .

"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"
Cd.Universitaria D.F., a 07 de NOV. de 1994.

EL DIRECTOR DE TESIS

M.en C. VICENTE FUENTES GEA

VFG*evi.

Cd. Universitaria, México, D. F., C. P. 045:0, Apdo. Postal 70-256 Tel. 548-09-50 Fax 548-09-50

FALLA DE ORIGEN

A Dios y a mis padres, fuentes inagotables de amor, comprensión y apoyo, porque sin su generosa entrega y desinterés no hubiera alcanzado los logros de mi vida que son realmente suyos, y a quienes no puedo decir algo menos que ¡Gracias!

A mis maestros por su dedicación y cariño pero muy en especial al M. en C. Vicente Fuentes Ges, que más que un profesor es un amigo, gracias por su interés y paciencia.

A mis compañeros y amigos, que juntos supimos hacer un grupo que vivirá en mi corazón para siempre.

A mis familiares, amigos y a todos aquellos que de alguna forma contribuyeron a la realización de este trabajo, Gracias.

FALLA DE ORIGEN

AGRADECIMIENTOS

A la Universidad Nacional Autónoma de México por brindarme todas las facilidades para la realización de este proyecto, pero muy en especial a la Facultad de Química y a la División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería (DEPFI).

Al personal del Laboratorio de Física de la Facultad de Química por su gran ayuda, pero muy en especial a la Coordinadora de Física Experimental, M. en C. Ma. de los Angeles Olvera Treviño y a los asesores del Laboratorio de Cómputo (CECOLFI).

A los Maestros y personal de la DEPFI, pero en especial a la Dra. Georgina Fernández Villagómez y a la M. en I. Francis Soler Anguiano por su apoyo e interés.

"El que conoce a los demás es inteligente,
El que se conoce a sí mismo es iluminado,
El que vence a los demás es fuerte,
El que se vence a sí mismo es la fuerza,
El que se contenta es rico,
El que se esfuerza sin cesar es voluntarioso,
El que permanece en su puesto, vive largamente,
El que muere y no perece, es eterno."

Lao Tsé.

Fragmento del "Tao Te King"

INDICE.

INTRODUCCION.	1
1.- GENERALIDADES	2
2.- CALCULO DE LA EMISION A LA ATMOSFERA DE UN LIQUIDO DERRAMADO A LA INTEMPERIE	8
2.1 DETERMINACION DEL GASTO DE SUBSTANCIA DERRAMADA	8
2.2 ESTIMACION DE LA EXTENSION DEL DERRAME EN EL ESTADO ESTACIONARIO	9
2.3 CALCULO DE LA EMISION DE LA SUBSTANCIA A LA ATMOSFERA UNA VEZ BLOQUEADA LA FUGA	23
3.- CALCULO DE LA EMISION A LA ATMOSFERA DE UN GAS LICUADO	27
3.1 CALCULO DE LA EMISION INSTANTANEA	27
3.2 CALCULO DE LA EMISION POR LA VAPORIZACION DEBIDA A LA DIFERENCIA DE TEMPERATURAS ENTRE EL SUELO Y EL DERRAME	31
3.3 CALCULO DEL TIEMPO EN QUE ES PREDOMINANTE LA TRANSFERENCIA DE MASA DEBIDA A DIFERENCIAS DE TEMPERATURA (tc)	43
3.4 CALCULO DE LA EMISION POR CONVECCION FORZADA	43
4.- ESTIMACION DE PROPIEDADES FISICOQUIMICAS Y TERMODINAMICAS	46
4.1 PROPIEDADES DEL AIRE	46
4.2 PROPIEDADES DE LA SUBSTANCIA DERRAMADA	52
4.3 PROPIEDADES DEL SUELO	57

5.- APLICACION DEL MODELO	60
5.1 ALGORITMO DEL PROGRAMA DE COMPUTADORA	60
5.2 SIMULACION CON EL PROGRAMA DE COMPUTADORA	62
5.3 CORRELACION DE SUTTON	68
5.4 RESULTADOS DE LA COMPARACION CON LA CORRELACION DE SUTTON	70
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	71
SIMBOLOGIA.	74
REFERENCIAS	78
APENDICES	81

INDICE DE FIGURAS

	pag.
Fig. 2.1.-) Torre de Paredes Mojadas.	17
Fig. 3.1.-) Diagrama Presión - Entalpia.	28
Fig. 3.2.-) Aparato para la Determinación de Nu.	39
Fig. 3.3.-) Comportamiento de las Ecuaciones de Transferencia de Masa.	42
Fig. 5.1.-) Plano General de Localización del Almacén de Gas L.P. de San Juanico.	64
Fig. 5.2.-) Comparación de la Emisión del Modelo y de la Correlación de Sutton para el etanol.	66
Fig. 5.3.-) Comparación de la Emisión del Modelo y de la Correlación de Sutton para el agua.	66

INTRODUCCION.

Una sustancia peligrosa almacenada muestra su peligrosidad únicamente cuando sale del recipiente que la contiene. Esta sustancia puede ser líquida, sólida o gaseosa, aunque las que pueden dispersarse fácilmente son las líquidas y las gaseosas; este trabajo modela la emisión a la atmósfera del líquido o del gas licuado liberado, calculando las cantidades de las sustancias que se vaporizan y que eventualmente pudieran causar daño a la salud debido a su peligrosidad.

En el primer capítulo se explica conceptualmente el desarrollo del modelo según las diferentes circunstancias en las que se puede presentar el derrame (si la sustancia es líquida o gaseosa en condiciones normales); posteriormente en los capítulos dos y tres se analizan matemáticamente los conceptos expuestos en el primer capítulo. En el cuarto capítulo se muestran los métodos empleados para estimar las propiedades de las sustancias involucradas en el modelo, y por último en el quinto capítulo se presentan los resultados obtenidos con un programa de computadora en donde se simulan los procesos explicados y se comparan con una ecuación empírica obtenida originalmente para la vaporización de agua de los océanos (la ecuación de Sutton). Los objetivos que se persiguieron durante la realización del presente trabajo fueron los siguientes:

- a) Explicar los fundamentos fisicoquímicos y matemáticos de un modelo para la predicción de la vaporización de una sustancia peligrosa derramada accidentalmente.
- b) Aplicar el modelo al cálculo de la emisión a la atmósfera de la sustancia que se vaporiza al estar en contacto con la atmósfera.

CAPITULO I.

GENERALIDADES.

La humanidad ha avanzado considerablemente en el empleo de los recursos naturales, separando las substancias químicas de que están compuestos, e incluso sintetizándolas. Es en este siglo con el desarrollo masivo de los plásticos, que la industria química ha tenido su auge con muchos beneficios e inconvenientes; los beneficios se pueden observar todos los días en hogares, oficinas, escuelas, en nuestro propio cuerpo, etc. Los plásticos han hecho la vida del ser humano más fácil y placentera, sin embargo en las industrias donde éstos son fabricados, se almacenan millones de toneladas de substancias potencialmente peligrosas, principalmente solventes orgánicos indispensables para la síntesis de nuevos productos.

Una substancia peligrosa es aquella "que estando en cualquier estado físico, por sus características corrosivas, tóxicas, venenosas, reactivas, explosivas, inflamables, biológicas infecciosas o irritantes, representa un peligro para el equilibrio ecológico o el ambiente" (ref. 12).

Como se mencionó anteriormente, las substancias más comunes en las industrias de proceso son los solventes orgánicos por la amplia variedad de usos que pueden dárseles; sus características son muy variables, aunque en general puede decirse que son volátiles, altamente inflamables y/o explosivos y tóxicos (pudiendo provocar desde cáncer hasta esterilidad); existen también substancias orgánicas muy ligeras que son gases en condiciones normales, proviniendo la mayoría de ellas del

petróleo y gas natural; estas sustancias deben almacenarse y transportarse en forma líquida a altas presiones por razones económicas.

Los contenedores de este tipo de sustancias, así como de compuestos inorgánicos peligrosos como el cloro, deben adecuarse a las propiedades de cada sustancia a almacenar, es evidente que deben contar con los dispositivos de seguridad necesarios como válvulas de seguridad, válvulas de desfogue, discos de ruptura (en caso necesario) y manómetros; así como de programas de mantenimiento preventivo y correctivo eficientes, que contemplen pruebas al espesor de los contenedores, calibración de válvulas e instrumentos, y señalización claramente visible de la peligrosidad de la sustancia almacenada. Las compañías que transportan y almacenan sustancias peligrosas deben contar con las hojas de datos de seguridad (Material Safety Data Sheet) para cada sustancia, lo más completa posible.

El daño que provoca una sustancia peligrosa al hombre depende de varios factores, entre ellos su concentración, tiempo de exposición, susceptibilidad de la persona hacia la sustancia, vía de entrada al cuerpo, etc., por lo que es evidente que los daños a la salud se presentan cuando el compuesto almacenado sale de su contenedor y se expone al medio ambiente, pudiendo entrar en contacto con personas. Las fallas en los contenedores que llevan a derrames de sustancias peligrosas se deben a una sobrepresión del líquido almacenado, esta presión excesiva se debe a tres razones principales:

- a) El espesor del recipiente ha disminuido por corrosión y es demasiado pequeño para soportar la presión interna,
- b) Ha habido un aporte energético externo que ha elevado la temperatura del líquido almacenado y por lo tanto la presión del vapor presente,

- c) La válvula de seguridad y/o su manómetro no han funcionado adecuadamente y no han podido descargar la presión interna.

La mayor parte de estas fallas se deben a errores humanos, de ahí la importancia de una adecuada capacitación a equipos de mantenimiento, operadores, transportistas y demás personal que labora directamente en el transporte y almacenamiento de sustancias peligrosas, además de contar con la información necesaria para hacer frente a desastres que involucren a estas sustancias.

Existen procedimientos normales para el control de este tipo de contingencias, sin embargo requieren de equipo de protección personal y de control especializado, del que se carece frecuentemente. Este modelo proporciona una herramienta para saber la cantidad de la sustancia que se vaporiza a la atmósfera, lo que permite saber si la concentración excede los límites máximos permisibles indicados en las respectivas normas ecológicas, aunque es importante aclarar que debe acoplarse a un modelo de difusión para conocer el comportamiento de la sustancia vaporizada en la atmósfera identificando los lugares que serán afectados y el grado de afectación; estos modelos son muy útiles para hacer el análisis de riesgo de los lugares donde se almacenen y/o se transporten sustancias peligrosas.

Según las características de la sustancia que se derrama, pueden presentarse dos situaciones diferentes:

a) La sustancia derramada está en fase líquida a temperatura y presión ambiente, lo que implica que al derramarse forma una superficie extensa a dichas condiciones, en la que no hay diferencia entre la temperatura de la superficie del derrame y la atmósfera; en este caso, la sustancia se evaporará únicamente por acción del viento que sopla sobre el área del derrame, el cual transporta moléculas de la sustancia hacia la atmósfera; para que se presente este transporte, se requiere que se forme una

película delgada de vapor saturado sobre la superficie del líquido derramado, este vapor se genera por la energía tomada de las moléculas del propio líquido que se encuentran debajo de la película de vapor saturado. La rapidez de vaporización depende principalmente de la diferencia entre la concentración del vapor en la superficie del líquido derramado (concentración de saturación) y la concentración de la sustancia en el aire. Este mecanismo de transporte de masa se conoce como "convección forzada"; la convección es la transferencia de masa o calor mediante el movimiento de un fluido. Es importante aclarar que en el caso de lo que se denomina convección natural, el movimiento se debe a la diferencia de densidades que se presentan en el seno del fluido como resultado de una diferencia de temperatura; por ejemplo, si se deja un recipiente con agua sobre un calentador, el agua del fondo se calentará, disminuyendo su densidad, al tener densidad menor que el agua fría en la parte superior, el agua caliente subirá, transmitiendo el calor del fondo a la superficie; en cambio en la convección forzada, la corriente del fluido se produce por medio de un medio mecánico, de tal forma que las características del flujo estén determinadas fundamentalmente por una fuerza externa, y no por diferencia de densidades como en el caso de convección natural. En general, la magnitud de la transferencia de masa o calor por este mecanismo es mayor que en la convección natural.

Es importante indicar que en este caso, se considera que el suelo no es poroso porque es el peor caso en la contaminación atmosférica, de otra forma, la emisión resultaría menor a la calculada porque el derrame no alcanzaría las dimensiones estimadas.

Algunos ejemplos de sustancias de interés práctico que por sus propiedades fisicoquímicas se encuentran en este caso son:

- a) Alcoholes (metanol, etanol, etc.),
- b) Solventes aromáticos (benceno, xileno, tolueno, fenol, etc.)

- c) Cetonas (acetona, metil-etil cetona, metil-isobutil cetona, etc.)

Es importante indicar que al iniciarse el derrame se calcula la extensión máxima del derrame (en estado estacionario) para estimar el peor caso, pero al bloquear la fuga se hace el cálculo de la disminución de la extensión del derrame en función del tiempo; el área del derrame así obtenida se emplea para calcular la emisión en función del tiempo, pero principalmente para alimentar un modelo de difusión de área que escapa a los objetivos del presente trabajo y que por lo tanto no se trata.

b) En el segundo caso se tiene la fuga de una sustancia almacenada a alta presión, esto implica que se encuentra en forma de vapor a temperatura y presión ambiente, por lo que en el momento del derrame habrá una vaporización instantánea provocada por la disminución de la presión; posteriormente se formará una superficie de sustancia derramada de dimensión constante (porque se evapora al mismo tiempo que se forma) cuya temperatura corresponde al punto normal (es decir, a presión atmosférica) de ebullición de la sustancia derramada (que es menor a la temperatura atmosférica); debido a la gran diferencia de temperatura entre el líquido derramado, la atmósfera y el suelo, se presenta una transferencia de calor por conducción del suelo y la atmósfera al líquido derramado. Este calor transferido se emplea para vaporizar al líquido derramado, aunque esta vaporización disminuye conforme transcurre el tiempo, porque las temperaturas tienden a igualarse; al mismo tiempo, hay una transferencia de masa por convección forzada semejante a la que se presenta en el caso anterior, que sólo depende de la extensión del derrame y de la velocidad del viento, que es independiente del tiempo, por lo que paulatinamente va predominando al disminuir la vaporización debida a la transferencia de calor por diferencia de temperaturas entre el suelo, la atmósfera y el líquido derramado. Como conclusión, se puede decir que al presentarse el derrame hay una vaporización instantánea, y que al pasar el tiempo, el mecanismo que controla la transferencia de masa es la vaporización

por diferencia de temperatura entre la sustancia derramada y el ambiente, para después dar lugar a la transferencia de masa por convección forzada. En este caso se considera por medio de factores de corrección la posibilidad de que el suelo sea poroso y que tenga mantos freáticos que pudieran congelarse, porque las dimensiones del derrame se alimentan como datos y porque estas circunstancias afectarían mucho la transferencia de calor del suelo al derrame.

Como ejemplos prácticos de sustancias que se encuentren en este caso se pueden mencionar:

- a) Hidrocarburos saturados (butano, propano, etc.),
- b) Hidrocarburos insaturados (etileno, butadieno, etc.),
- c) Derivados de los anteriores (óxido de etileno, etc.)
- d) Sustancias gaseosas inorgánicas de interés industrial que por costos deben almacenarse y transportarse en forma líquida como el amoníaco o el cloro.

En este trabajo se exponen los fundamentos fisicoquímicos del modelo para una mejor comprensión y por lo tanto un mejor uso del mismo, porque es al conocer las suposiciones sobre las que se desarrollan las ecuaciones que conforman el modelo y sus soluciones (analíticas o numéricas según el caso), que se entienden y aplican correctamente las limitaciones y alcances de los resultados obtenidos con las simulaciones que pueden realizarse. El modelo desarrollado se emplea cuando no se cuenta rápidamente con el equipo necesario para controlar la fuga o mientras se controla ésta, puesto que es indispensable conocer el comportamiento del agente derramado para evitar daños a poblaciones cercanas.

CAPITULO II.

CALCULO DE LA EMISION A LA ATMOSFERA DE UN LIQUIDO DERRAMADO A LA INTEMPERIE.

Como se explicó anteriormente, cuando una substancia es derramada accidentalmente al aire libre, se transportará a la atmósfera siguiendo mecanismos que dependen de' estado físico en que se encuentre a temperatura y presión atmosféricas. En este capítulo se cuantificará la cantidad de substancia que se emite desde la superficie del derrame hacia la atmósfera en el caso en que la substancia sea líquida a temperatura y presión normales; se considera que el suelo no es permeable por lo que el cálculo de la longitud del derrame es el máximo posible.

En este caso, el procedimiento de cálculo implica los siguientes pasos:

- a) Determinación del gasto de substancia derramada,
- b) Estimación de la extensión del derrame en estado estacionario,
- c) Cálculo de la emisión de la substancia a la atmósfera una vez bloqueada la fuga.

2.1.-) DETERMINACION DEL GASTO DE SUBSTANCIA DERRAMADA:

El balance de masa del derrame es (éste se deduce en el apéndice I):

$$\frac{\partial M}{\partial t} = Q_d - Q_v \quad (2.1)$$

donde Q_v es el gasto másico de substancia vaporizada a la

atmósfera, Q_v es el gasto del derrame, M es la masa total y t el tiempo. La ecuación (2.1) expresa que la variación de la masa de la substancia respecto al tiempo al derramarse sobre el suelo depende de la diferencia entre el gasto de vaporización y el gasto del derrame.

En el estado estacionario, es decir, cuando el derrame ha alcanzado su extensión máxima y la vaporización es constante, la variación de masa con respecto al tiempo se hace cero, y la ecuación (2.1) queda:

$$Q_v = Q_d \quad (2.2)$$

Es importante hacer notar que al hacer el cálculo en el estado estacionario, se está despreciando la emisión generada al inicio del proceso de formación, lo cual implica que se está calculando sobre el peor caso, es decir, cuando la emisión es máxima; esto supone que en el momento en que se presenta la fuga de la substancia, instantáneamente el derrame alcanza su extensión máxima y por lo tanto la emisión es también máxima.

La ecuación (2.2), muestra que al medir el gasto de substancia derramada, se conoce también el gasto de substancia vaporizada (Q_v), el cual es posible relacionar con la extensión del derrame como se explica a continuación:

2.2.-) ESTIMACION DE LA EXTENSION DEL DERRAME EN EL ESTADO ESTACIONARIO:

Primero se debe establecer una función matemática que relacione la extensión del derrame con el gasto de vaporización, para ello se formula un modelo de transferencia de masa de la substancia, que busca predecir el flujo másico desde la superficie del derrame a la corriente de aire que sopla sobre ella:

El transporte de masa en este caso, depende de las siguientes variables:

- a) La viscosidad absoluta del aire, μ ,
- b) La densidad del aire, ρ
- c) La velocidad del viento a nivel de piso, v
- d) La distancia que recorre el viento sobre la superficie del vapor licuado, L ,
- e) El coeficiente de difusión del vapor en la atmósfera, D ,
- f) El coeficiente de transferencia de masa, h_c .

Los dos últimos coeficientes representan constantes de proporcionalidad en las ecuaciones que calculan el flujo másico de la sustancia del derrame a la atmósfera, y conviene discutir su origen.

La ley de Fick establece que el flujo másico de una sustancia que se transporta en un medio (en este caso la atmósfera) por difusión, es proporcional al gradiente de concentración (C_A) de la sustancia en el medio (en este caso particular, el gradiente es respecto a la altura, es decir, respecto al eje z)

Matemáticamente se puede expresar como:

$$J_A = - D \frac{\partial C_A}{\partial z} \quad (2.3)$$

donde J_A es el gasto másico vaporizado por unidad de área superficial del derrame (Q/A) con unidades de: masa/(tiempo longitud²), D es la difusividad o coeficiente de difusión de la sustancia en el medio que es una característica de la sustancia y de su entorno (temperatura, presión, concentración y la naturaleza de otras sustancias presentes). El signo menos hace hincapié en que la difusión ocurre en el sentido del decremento en concentración. Se puede observar que las unidades de la difusividad son longitud²/tiempo.

El gasto másico por unidad de área de la sustancia también puede ser expresado por su proporcionalidad con una diferencia de

concentración de la substancia entre la superficie del líquido derramado y la corriente de aire:

$$J_A = k_c \Delta C_A \quad (2.4)$$

donde k_c es la constante de proporcionalidad, que tiene unidades de longitud/tiempo, y que se conoce como *coeficiente de transferencia de masa*.

Debido a que el interés en este momento es estimar la extensión del área del derrame, primero se debe poner el coeficiente de transferencia de masa en función del área superficial del derrame, para posteriormente sustituirla en la ecuación (2.4):

$$Q_v = k_c A \Delta C_A \quad (2.5)$$

y tener la extensión del derrame en función del gasto de vaporización (Q_v), previamente determinado. En la ecuación (2.5), A representa el área superficial total del derrame y ΔC_A la diferencia de concentración de la substancia entre la película de vapor saturado en la superficie del derrame y la atmósfera.

Se procede entonces a establecer una relación matemática entre el coeficiente de transferencia de masa y la extensión de la superficie del derrame por análisis dimensional. Los resultados finales de un análisis dimensional pueden expresarse como sigue: Si una variable dependiente con dimensiones dadas es función de alguna relación dentro de un grupo de variables, las variables individuales del grupo deben relacionarse de tal manera que las dimensiones netas del grupo sean idénticas con aquéllas de la variable dependiente. Las variables independientes pueden estar también relacionadas de tal manera que las variables dependientes se definan por la suma de varios grupos diferentes de variables, en donde cada grupo tenga las dimensiones netas de la variable dependiente. Debido a que este método opera únicamente con las dimensiones de las variables, no se pueden producir resultados

numéricos directos a partir de las variables, sino que se producen módulos por medio de los cuales los datos observados pueden combinarse y establecerse así la influencia relativa de las variables.

Para establecer la relación entre el coeficiente de transferencia de masa y las demás variables se siguen los siguientes pasos:

I.-) Se establece una relación general de la forma:

$$(k_c) \propto (D, \mu, \rho, L, v) \quad (2.6)$$

es decir, que el coeficiente de transferencia de masa es proporcional a la difusividad del vapor en aire (D), viscosidad (μ) y densidad del aire (ρ), longitud del derrame en la dirección del viento (L) y velocidad del viento a nivel de piso (v). Para formar una ecuación, se introduce una constante de proporcionalidad (ϵ), y como se desconoce la variación de cada variable independiente con la dependiente (k_c), se eleva cada término a un exponente:

$$k_c = \epsilon D^a \mu^b \rho^c L^d v^e \quad (2.7)$$

II.-) Se descompone cada término en sus magnitudes:

$$\begin{aligned} k_c & [=] L/T \\ D & [=] L^2/T \\ \mu & [=] M/(L T) \\ \rho & [=] M/L^3 \\ L & [=] L \\ v & [=] L/T \end{aligned} \quad (2.8)$$

donde M es masa, L es longitud y T es tiempo. Una de las pruebas matemáticas importantes del análisis dimensional se atribuye a Buckingham (ref. 3) quien dedujo que el número de grupos dimensionales es igual a la diferencia entre el número de

variables y el número de dimensiones usadas para expresarlas. Las constantes dimensionales también son incluidas como variables. La prueba de este teorema ha sido presentada completamente por Bridgman (ref. 2). Como hay seis variables y tres magnitudes fundamentales, se obtendrá un total de $6-3 = 3$ grupos adimensionales independientes que relacionan las variables. Sustituyendo las magnitudes en la ecuación de proporcionalidad, se tiene:

$$\frac{L}{T} = \epsilon \left(\frac{L^2}{T} \right)^a \left(\frac{M}{LT} \right)^b \left(\frac{M}{L^3} \right)^c \left(L \right)^d \left(\frac{L}{T} \right)^e \quad (2.9)$$

Para hacer más manejable la ecuación, se acomoda linealmente:

$$L T^{-1} = \epsilon (L^2 T^{-1})^a (M L^{-1} T^{-1})^b (M L^{-3})^c (L)^d (L T^{-1})^e \quad (2.10)$$

III.-) Se introducen los exponentes a los paréntesis:

$$L T^{-1} = \epsilon L^{2a} T^{-a} M^b L^{-b} T^{-b} M^c L^{-3c} L^d L^e T^{-e} \quad (2.11)$$

IV.-) Se agrupan los exponentes de cada variable:

$$L T^{-1} M^0 = \epsilon L^{2a-b-3c+d+e} T^{-a-b-e} M^{b+c} \quad (2.12)$$

Para que la ecuación sea congruente, los exponentes de cada lado deben ser iguales, por lo tanto, se establece una ecuación por cada variable.

$$\begin{aligned} L : 1 &= 2a - b - 3c + d + e \\ T : -1 &= -a - b - e \\ M : 0 &= b + c \end{aligned} \quad (2.13)$$

V.-) Se resuelven las ecuaciones generadas simultáneamente (suponiendo que $c = e - d$):

$$\begin{aligned}
 a &= 1 - d \\
 b &= d - e \\
 c &= e - d \\
 d &= -1 + e \\
 e &= e
 \end{aligned}
 \tag{2.14}$$

Estas soluciones se escogieron de tal forma que los grupos dimensionales resultantes tuvieran una forma semejante a la solución propuesta por Mc Adams para transferencia de calor para flujo turbulento en tubos (ref. 24).

VI.-) Se sustituyen estos valores en la ecuación (2.7):

$$k_c = \xi D^{1-d} \mu^d \rho^{-d} L^{-1} v^e \tag{2.15}$$

VII.-) Se reagrupan los exponentes:

$$k_c = \xi D^1 D^{-d} \mu^d \mu^{-e} \rho^{-d} \rho^e L^{-1} L^e v^e \tag{2.16}$$

Se puede observar claramente que se tienen tres exponentes diferentes: uno numérico (1) y dos algebraicos (d y e). Agrupándolos se tiene:

$$k_c = \xi \left(\frac{D}{L} \right) \left(\frac{\mu}{D \rho} \right)^d \left(\frac{\rho L v}{\mu} \right)^e \tag{2.17}$$

Las variables cuyo exponente es uno, se agrupan en el miembro iz de la ecuación:

$$\frac{k_c L}{D} = \xi \left(\frac{\mu}{D \rho} \right)^d \left(\frac{\rho L v}{\mu} \right)^e \tag{2.18}$$

Al conjunto de variables del miembro izquierdo de la ecuación, se le conoce como *número de Sherwood* (Sh) (ref. 26); al término elevado al exponente d se le conoce como *número de Schmidt* (Sc), y el último término representa el *número de Reynolds* (Re).

Los números adimensionales son utilizados porque generalizan la solución de un problema a otros muchos. Por lo tanto, la ecuación (2.18) queda:

$$Sh = C (Sc)^d (Re)^e \quad (2.19)$$

Para este caso en particular, C , d y e son función de:

- a) Las propiedades del gas licuado,
- b) La velocidad del viento,
- c) La temperatura,
- d) La longitud del derrame en la dirección en que sopla el viento.

Para encontrar numéricamente la constante C y los exponentes d y e , se realizan experimentos en un equipo conocido como "torre de paredes mojadas" (fig 2.1), de tal forma que se puedan relacionar los módulos adimensionales con cantidades medibles; Para calcular los módulos adimensionales, se mide la concentración de la substancia en el aire (en estado estacionario) a diferentes velocidades de aire conocidas y se calcula el coeficiente de transferencia de masa. Por lo que estos datos experimentales son válidos únicamente cuando el sistema en que se apliquen sea equivalente a aquel en que se experimentó, es decir, que la substancia derramada se encuentre a temperatura y presión atmosféricas.

Hay dos formas de encontrar el valor numérico de los exponentes (d y e) y de la constante (C); una de ellas es el método algebraico en el que se hacen tres mediciones para obtener tres valores diferentes del número de Schmidt, número de Sherwood y número de Reynolds; al substituir los valores en la ecuación (2.19), se obtienen tres ecuaciones simultáneas, que al ser resueltas, proporcionan los valores para los exponentes (d y e) y la constante (C); sin embargo para minimizar los errores experimentales, es aconsejable emplear una cantidad numerosa de datos y correlacionarlos mediante un método de ajuste para obtener

ζ , d y e ; en esta ocasión se empleará el método de cuadrados mínimos por ser el más sencillo y usado. Para ello se reescribe la ecuación (2.19):

$$(Sh) (Sc)^{-d} = \zeta (Re)^e \quad (2.20)$$

que es una ecuación de la forma:

$$y = \zeta x^e \quad (2.21)$$

donde y es $(Sh) (Sc)^{-d}$ y x es (Re) ; esta ecuación puede ser linealizada tomando los logaritmos de ambos miembros:

$$\log y = \log \zeta + e \log x \quad (2.22)$$

en coordenadas logarítmicas se obtiene una ecuación de la forma:

$$y = \zeta + e x \quad (2.23)$$

En estas coordenadas, el grupo $[\log ((Sh) (Sc)^{-d})]$ es la ordenada, $[\log (Re)]$ es la abscisa, e es la pendiente de la recta que mejor se ajusta a los datos experimentales, y $[\log \zeta]$ es el valor de la ordenada al origen.

Es importante hacer hincapié en que en la experimentación se mide la velocidad del viento en la superficie del líquido derramado (para variar el número de Reynolds y por lo tanto las abscisas) y la concentración de la substancia en el aire en estado estacionario (para calcular el coeficiente de transferencia de masa y obtener el valor del número de Sherwood, y por lo tanto de las ordenadas, dado que el número de Schmidt se mantiene constante para cada corrida).

Para efectuar el ajuste, se debe suponer el exponente d , es importante indicar que no es necesario experimentar para cada valor de d , sino que se hace una regresión para cada valor de d con los mismos datos experimentales y se toma como correcta

aquella que dé un coeficiente de correlación más cercano a la unidad como se indicó anteriormente.

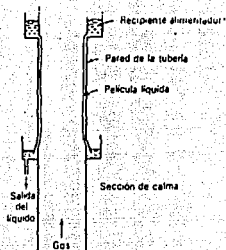


Fig. 2.1.- Torre de paredes mojadas (ref. 31)

Substituyendo los valores obtenidos en el análisis de regresión en la ecuación (2.19), se obtienen las siguientes ecuaciones de regresión (ref. 26):

- a) Para régimen laminar ($Re < 2 \cdot 10^5$):

$$Sh = 0.332 (Sc)^{1/3} (Re)^{1/2} \quad (2.24)$$

- b) Para régimen turbulento ($Re > 3 \cdot 10^6$):

$$Sh = 0.0296 (Sc)^{1/3} (Re)^{0.8} \quad (2.25)$$

Por razones prácticas, se considera un número de Reynolds de transición de 320,000 (ref. 24), bajo este criterio, la ecuación (2.24) es válida para números de Reynolds menores a 320,000 y la ecuación (2.25) es válida para números de Reynolds mayores a 320,000.

Se ha observado que el flujo sobre una superficie plana siempre es laminar al principio, así que para considerar ambas regiones (laminar y turbulenta), se calcula un coeficiente de transferencia de masa promedio:

$$\bar{K}_c = \frac{1}{L} \left[\int_0^{X_{tr}} K_{c \text{ laminar}} dx + \int_{X_{tr}}^L K_{c \text{ turbulento}} dx \right] \quad (2.26)$$

donde \bar{K}_c es el coeficiente de transferencia de masa promedio, X_{tr} es la distancia de transición entre un régimen laminar y uno turbulento y L es la longitud del derrame en la dirección del viento. El coeficiente de transferencia de masa bajo régimen laminar ($K_{c \text{ laminar}}$) y el coeficiente de transferencia de masa bajo régimen turbulento ($K_{c \text{ turbulento}}$) se calculan a partir de la definición del número de Sherwood, donde el número de Sherwood (Sh) se calcula con la ecuación (2.24) para régimen laminar o con la ecuación (2.25) para régimen turbulento, de tal forma que:

$$K_{c \text{ laminar}} = (Sh \text{ laminar}) D / X \quad (2.27)$$

$$K_{c \text{ turbulento}} = (Sh \text{ turbulento}) D / X \quad (2.28)$$

donde X es la distancia a partir del borde del derrame en la dirección en que sopla el viento.

Substituyendo las ecuaciones (2.27) y (2.28) en la ecuación (2.26), se tiene:

$$\bar{K}_c = \frac{1}{L} \left[\int_0^{X_{tr}} \frac{(Sh \text{ laminar}) D}{X} dx + \int_{X_{tr}}^L \frac{(Sh \text{ turbulento}) D}{X} dx \right] \quad (2.29)$$

Substituyendo las ecuaciones (2.24) y (2.25) en la ecuación (2.29), se tiene:

$$\bar{K}_c = \frac{1}{L} \left[\int_0^{X_{tr}} \frac{(0.332 (Sc)^{1/3} (Re)^{1/2}) D}{X} dx + \int_{X_{tr}}^L \frac{(0.0296 (Sc)^{1/3} (Re)^{0.8}) D}{X} dx \right]$$

(2.30)

En los numeradores, la única variable que depende de la distancia es el número de Reynolds (Re), así que el resto del numerador se expresa como una constante (ζ_1 y ζ_2):

$$\bar{K}_c = \frac{D}{L} \left[\zeta_1 \int_0^{X_{tr}} \frac{(X)^{1/2}}{X} dx + \zeta_2 \int_{X_{tr}}^L \frac{(X)^{0.8}}{X} dx \right]$$

(2.31)

$$\text{donde } \zeta_1 = 0.332 (Sc)^{1/3} (\rho X v/\mu)^{1/2} D \quad y$$

$$\zeta_2 = 0.0296 (Sc)^{1/3} (\rho X v/\mu)^{0.8} D$$

Ya que el número de Reynolds (Re) = $\rho X v/\mu$, donde ρ es la densidad, v la velocidad y μ la viscosidad del aire.

$$\bar{K}_c = \frac{D}{L} [2 \zeta_1 (X_{tr})^{1/2} + 1.25 \zeta_2 (L^{0.8} - X_{tr}^{0.8})]$$

(2.32)

Reagrupando términos y substituyendo ζ_1 y ζ_2 en la ecuación (2.32), se obtiene:

$$\bar{K}_c L/D = \bar{Sh} = (2) (0.332 (Sc)^{1/3} (Re_{tr})^{1/2}) + \\ + (1.25) (0.0296 (Sc)^{1/3} (Re^{0.8} - Re_{tr}^{0.8}))$$

Es decir:

$$\bar{Sh} = (0.664 (Sc)^{1/3} (Retr)^{1/2}) + [0.037 (Sc)^{1/3} (Re^{0.8} - Retr^{0.8})] \quad (2.33)$$

donde $Retr$ es el número de Reynolds que corresponde a la distancia de transición (X_t), es decir, el número de Reynolds de transición, definido anteriormente como 320,000. Cuando el número de Reynolds es menor al número de Reynolds de transición, se tiene un régimen de flujo laminar puro que no rebasa el primer sumando y que no da un significado físico al segundo sumando; por lo que la ecuación (2.33) se convierte en:

$$\bar{Sh} = 0.664 (Sc)^{1/3} (Re)^{1/2} \quad (2.34)$$

para $Re < 320,000$

Si el número de Reynolds es mayor al número de Reynolds de transición, se tiene un régimen de flujo turbulento, por lo que se substituye el valor numérico del número de Reynolds de transición en la ecuación (2.33) y se obtiene:

$$\bar{Sh} = 0.664 (Sc)^{1/3} (320,000)^{1/2} + (0.037 (Sc)^{1/3} (Re^{0.8} - (320,000)^{0.8}))$$

$$\bar{Sh} = 375.61 Sc^{1/3} + 0.037 Sc^{1/3} (Re^{0.8} - 25358.29) \quad (2.35)$$

En la ecuación (2.35) se divide el primer sumando entre 0.037 y se factoriza:

$$\bar{Sh} = 0.037 Sc^{1/3} (Re^{0.8} - 25358.29 + (375.61/0.037))$$

Lo cual da un resultado de:

$$\bar{Sh} = 0.037 (Sc)^{1/3} [(Re)^{0.8} - 15200] \quad (2.36)$$

para $Re > 320,000$

Estas correlaciones para calcular el número de Sherwood promedio a partir del número de Reynolds y del número de Schmidt,

son válidas para valores de número de Schmidt mayores a 0.5 (ref. 24)

Es importante hacer notar que el número de Reynolds se calcula con la velocidad del aire respecto a la pared de la torre de paredes mojadas, no respecto a la película de líquido; en el caso del derrame de un líquido a la intemperie equivale a decir que se toma en cuenta la velocidad del aire respecto al suelo y no respecto a la superficie del líquido que es móvil.

Para aplicar el modelo a una simulación, se procede de la siguiente manera:

1.-) Se calcula el número de Sherwood con los datos disponibles, empujando la ecuación (2.34) o (2.36), dependiendo del número de Reynolds,

2.-) Se obtiene el coeficiente de transferencia de masa (\bar{K}_c) de la siguiente expresión:

$$\bar{K}_c = (\bar{S}h)D/L \quad (2.37)$$

3.-) Una vez que se obtiene \bar{K}_c , se emplea la ecuación (2.4) para conocer el gasto másico por unidad de área total (J_A):

$$J_A = \bar{K}_c (C_1 - C_0) \quad (2.38)$$

donde C_1 es la concentración de la sustancia en la película de vapor saturado en la superficie del derrame, y C_0 es la concentración inicial de la sustancia en el aire que sopla sobre el derrame. Si se considera que el aire inicialmente está puro, se tiene:

$$J_A = \bar{K}_c C_1 \quad (2.39)$$

Para líquidos vaporizados, la concentración de la sustancia en la película superficial de vapor corresponde a la saturación,

de manera que se puede emplear la densidad a la temperatura del punto normal de ebullición. Por lo anteriormente expuesto, la ecuación (2.39) se convierte en:

$$J_A = \bar{K}_c \rho_v \quad (2.40)$$

Para obtener el gasto másico de sustancia vaporizada (Q_v), se multiplica el gasto másico por unidad de área, que tiene unidades de masa/(tiempo longitud²), por el área del derrame expuesta a la transferencia de masa:

$$Q_v = (J_A)(A) = \bar{K}_c A \rho_v \quad (2.41)$$

Para continuar, se debe encontrar una expresión matemática que relacione al área total del derrame con una dimensión característica del mismo. Para ello se supone que la superficie es circular de diámetro L porque es la forma a la que tienden todos los líquidos al derramarse libremente. Aplicando esta consideración en la ecuación (2.41) para obtener el área del derrame y substituyendo la forma de cálculo de \bar{K}_c de la ecuación (2.37) en la ecuación (2.41), se tiene:

$$Q_v = \bar{K}_c A \rho_v = \left(\bar{Sh} \frac{D}{L} \right) \frac{\pi}{4} L^2 \rho_v = (\bar{Sh} D) \frac{\pi}{4} L \rho_v \quad (2.42)$$

Esta ecuación es general, para aplicarla se requiere conocer el régimen de flujo presente, como se explica a continuación:

a) Si el flujo es laminar se utiliza la ecuación (2.34) para calcular el número de Sherwood promedio. Substituyendo la ecuación (2.34) en la (2.42) y simplificando términos se tiene:

$$Q_v = \left[0.664 (Sc)^{1/3} \left(\frac{\rho_v}{\mu} \right)^{1/2} \right] \frac{\pi}{4} L^{3/2} D \rho_v \quad (2.43)$$

Se despeja L:

$$L = \left[\frac{Q_v}{0.664 (Sc)^{1/3} \left(\frac{\rho v}{\mu} \right)^{1/2} \frac{\pi}{4} D \rho_v} \right]^{2/3} \quad (2.44)$$

Como se puede observar, la longitud no depende del tiempo, porque el cálculo se realizó suponiendo estado estacionario, donde el gasto másico del derrame (Q_d) es igual al gasto másico de vaporización (Q_v).

b) Por otro lado si se tiene flujo turbulento, se emplea la ecuación (2.36) para calcular el número de Sherwood promedio. Substituyendo la ecuación (2.36) en la (2.42) y simplificando términos se obtiene:

$$Q_v = 0.037 (Sc)^{1/3} \left[\left(\frac{\rho v}{\mu} \right)^{0.8} L^{1.8} - 15200 L \right] \frac{\pi}{4} D \rho_v \quad (2.45)$$

Se puede observar que en la ecuación (2.45), L no puede despejarse de manera directa, por lo que debe resolverse por algún método numérico iterativo. En este trabajo se decidió emplear el método de Newton-Raphson (ref. 8 y 14) por ser sencillo y rápido.

2.3.-) CALCULO DE LA EMISION DE LA SUBSTANCIA A LA ATMOFERA UNA VEZ BLOQUEADA LA FUGA.

El modelo de transferencia de masa hasta aquí expuesto se desarrolló para estado estacionario, en el que tanto la emisión como la extensión del derrame son independientes del tiempo. Pero en el momento en que la fuga se bloquea, el régimen deja de ser estacionario para convertirse en transitorio, porque la emisión y la extensión del derrame irán disminuyendo conforme transcurre el tiempo.

Para calcular la emisión en este caso, se parte de la ecuación (2.1), considerando que el gasto del derrame es cero ($Q_d = 0$).

$$\frac{\partial M}{\partial t} = Q_d - Q_v = 0 - Q_v = - Q_v \quad (2.46)$$

La masa que interviene en la ecuación (2.1) se obtiene de la siguiente expresión:

$$M = \rho_1 V = \rho_1 h A = \rho_1 h \frac{\pi}{4} L^2 \quad (2.47)$$

donde ρ_1 es la densidad del líquido derramado, V el volumen, h el espesor, A el área superficial y L el diámetro correspondiente al derrame.

Derivando la ecuación (2.47) respecto al tiempo se tiene:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 h \frac{\pi}{4} L^2) = \rho_1 h \frac{\pi}{4} \frac{\partial L^2}{\partial t} = \rho_1 h \frac{\pi}{4} 2 L \frac{\partial L}{\partial t} \quad (2.48)$$

Substituyendo la ecuación (2.48) en la ecuación (2.46), se tiene:

$$\frac{\pi}{4} \rho_1 h (2 L) \frac{\partial L}{\partial t} = - Q_v \quad (2.49)$$

El gasto de vaporización que interviene en la ecuación (2.49) se obtiene de las ecuaciones (2.43) o (2.45), dependiendo de si el régimen de flujo es laminar o turbulento:

Si se tiene régimen laminar ($Re < 320,000$) se substituye la ecuación (2.43) en la (2.49):

$$\frac{\pi}{4} \rho_1 h (2 L) \frac{\partial L}{\partial t} = - \left[0.664 (Sc)^{1/3} \left(\frac{\rho v}{\mu} \right)^{1/2} \right] \frac{\pi}{4} L^{3/2} D \rho_v \quad (2.50)$$

Simplificando la ecuación (2.50) se tiene:

$$L^{-1/2} \frac{\partial L}{\partial t} = -C \quad (2.51)$$

donde C es una constante cuyo valor es:

$$C = \frac{\left[0.664 (Sc)^{1/3} \left(\frac{\rho v}{\mu} \right)^{1/2} \right] D \rho v}{2 \rho_1 h} \quad (2.52)$$

Para resolver la ecuación diferencial (2.51) se separan variables y se integra entre límites:

$$\int_{L_0}^L L^{-1/2} \partial L = -C \int_0^t \partial t \quad (2.53)$$

donde L_0 es el diámetro del derrame en estado estacionario (longitud máxima). Resolviendo las integrales de la ecuación (2.53) se obtiene:

$$2 (L^{1/2} - L_0^{1/2}) = -C t \quad (2.54)$$

Despejando L:

$$L = \left(\frac{2 L_0^{1/2} - C t}{2} \right)^2 \quad (2.55)$$

Se puede observar que para $t = 0$, $L = L_0$; esto tiene un significado físico: En el instante de bloquear la fuga, la extensión del derrame es la inicial, posteriormente el diámetro del derrame (L) va disminuyendo hasta hacerse cero en $t = 2 L_0^{1/2}/C$; después de este tiempo la ecuación (2.55) no tiene significado físico.

Si por el contrario, se tiene régimen turbulento, se substituye la ecuación (2.45) en la (2.49) como sigue:

$$\frac{\pi}{4} \rho_1 h^2 L \frac{\partial L}{\partial t} = 0.037 (Sc)^{1/3} \left[\left(\frac{\rho v}{\mu} \right)^{0.8} L^{1.8} - 15200 L \right] \frac{\pi}{4} D \rho v \quad (2.56)$$

Se rearrregla la ecuación (2.56) para despejar la derivada temporal, y se tiene:

$$\frac{\partial L}{\partial t} = \left(\frac{0.037 (Sc)^{1/3} D \rho v}{2 \rho_1 h} \right) \left(\frac{\left[\left(\frac{\rho v}{\mu} \right)^{0.8} L^{1.8} - 15200 L \right]}{L} \right) \quad (2.57)$$

Es importante indicar que la ecuación (2.57) no puede resolverse analíticamente, por lo que requiere para su resolución de un método numérico. En este caso se empleará el de Runge-Kutta de cuarto orden (ref. 8 y 14).

Una vez calculando L para cualquier caso, se puede obtener Qv por medio de las ecuaciones (2.43) o (2.45), dependiendo del régimen presente que es función del número de Reynolds (Re), así pues el régimen es laminar si $Re < 320,000$ o turbulento si $Re > 320,000$ que a su vez depende principalmente de la velocidad del viento, puesto que las demás variables del número de Reynolds son constantes a una temperatura atmosférica dada. El principal interés del cálculo de la extensión del derrame en función del tiempo una vez bloqueada la fuga, radica en alimentar un modelo de difusión de área que no se trata en este trabajo por exceder su alcance.

CAPITULO III.

CALCULO DE LA EMISION A LA ATMOSFERA DE UN GAS LICUADO.

En el capítulo precedente, se cuantificó la emisión a la atmósfera de un líquido en condiciones normales que se pone en contacto accidentalmente con la atmósfera. En este caso se tratará un gas licuado que se vaporiza al salir de su contenedor, así que el proceso de cálculo de la emisión a la atmósfera comprende los siguientes pasos:

- a) Cálculo de la emisión instantánea.
- b) Cálculo de la emisión debida a la vaporización por diferencia de temperaturas entre la atmósfera, el suelo y el derrame en función del tiempo.
- c) Cálculo del tiempo que tarda en ser predominante la vaporización por diferencia de temperaturas.
- d) Cálculo de la emisión por convección forzada en estado estacionario.

Es importante hacer notar que a diferencia del caso analizado en el capítulo anterior, las dimensiones del derrame deben ser estimados por el usuario en el lugar del accidente.

3.1.-) CALCULO DE LA EMISION INSTANTANEA.

En la figura 3.1, se presenta un diagrama presión - entalpia típico, cuya forma es común a todas las sustancias; su

característica predominante es la curva en forma de campana (que es el resultado de graficar los puntos de presión - entalpia en la saturación). En este caso, la substancia almacenada se encuentra a la presión y temperatura indicados en el punto 1 (aproximadamente), es decir, en forma líquida; al disminuir bruscamente la presión (cuando sale de su contenedor), las condiciones de la substancia llegan a la línea de la campana de saturación en donde empieza a vaporizarse (punto 2); las líneas horizontales que se encuentran dentro de la campana son isotermas, así que la trayectoria que sigue la vaporización es horizontal hasta el punto 3 (horizontal porque la substancia emplea toda la energía disponible para llevar las moléculas al estado de vapor, y no para modificar su temperatura); si la trayectoria continuara hasta el punto 4, implicaría que la substancia se vaporiza completamente, así que realmente estará dentro de la campana durante todo el proceso, debido a que es demasiado el volumen de la substancia para llegar a la vaporización completa.

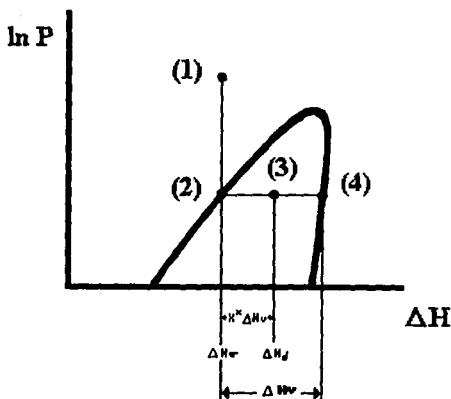


Fig. 3.1.- Diagrama presión-entalpia (ref. 27).

La posición del punto 3 depende de la masa de vapor producida por unidad de masa total o fracción másica de vapor (X^*), de tal forma que si no se vaporiza nada $X^* = 0$, y si se vaporiza completamente $X^* = 1$, así que $0 \leq X^* \leq 1$. La entalpia de la substancia derramada (ΔH_d) es igual a la suma de la entalpia de la substancia almacenada (ΔH_s) más la entalpia correspondiente a la cantidad de vapor producido (el calor latente de vaporización total ΔH_v multiplicado por la fracción másica de vapor), es decir:

$$\Delta H_d = \Delta H_s + X^* \Delta H_v \quad (3.1)$$

Despejando la fracción másica de vapor de la ecuación (3.1) se obtiene:

$$X^* = \frac{\Delta H_d - \Delta H_s}{\Delta H_v} \quad (3.2)$$

De la definición de la fracción másica de vapor se obtiene la cantidad vaporizada total en masa (m_v) como:

$$m_v = X^* m_o \quad (3.3)$$

donde m_o es la cantidad total másica de la substancia derramada y m_v la masa de vapor producida.

Para poder obtener el gasto de la vaporización instantánea, se requiere suponer que la cantidad vaporizada m_v sale durante un cierto tiempo; en teoría, la vaporización instantánea se produce de forma inmediata (como lo indica su nombre), pero en la realidad se observa que la salida de vapor se presenta durante un corto periodo de tiempo, arrastrando la substancia hacia la atmósfera e impidiendo que se forme la superficie del derrame. Por observaciones de diferentes derrames en sistemas de almacenamiento comúnmente usados, en la práctica se considera que la vaporización instantánea se presenta durante un minuto, por lo que el gasto de substancia vaporizada (Q_i) es:

$$Q_1 = m_v/t_1 \quad (3.4)$$

donde $t_1 = 1$ minuto (Este valor se obtiene de observaciones prácticas (ref. 7). Substituyendo las ecuaciones (3.2) y (3.3) en la ecuación (3.4) se tiene:

$$Q_1 = \left(\frac{\Delta H_d - \Delta H_{\sigma}}{\Delta H_v} \right) \cdot \frac{m_0}{t_1} \quad (3.5)$$

El resto del gas licuado permanece como líquido derramado en el suelo. Las dimensiones del derrame deben ser estimadas por el usuario porque debido a los numerosos mecanismos de transporte de calor y masa involucrados (y por ello la cantidad de variables presentes) resulta más adecuado emplear un valor medido, porque al estimar la extensión del derrame en el estado estacionario (como en el caso analizado en el capítulo anterior), el resultado teórico sería mucho mayor al real, dado que al derramarse un gas licuado la vaporización empieza tan rápidamente que no permite llegar al valor calculado; es importante hacer incapié en que el dato de la estimación física del espejo del derrame debe darse en la dirección en que sopla el viento, y el modelo supone que esta distancia corresponde a una forma circular con ese diámetro.

En este momento, la substancia derramada se encuentra a su temperatura normal de ebullición, que es mucho menor a la temperatura del suelo y de la atmósfera, por lo que recibe calor por dos procesos: por conducción del suelo y de la atmósfera, y por radiación del sol; este último mecanismo se vuelve importante solamente después de un largo periodo de exposición al aire libre, así que si se supone que el derrame se controlará lo más rápido posible, la transferencia de calor por radiación solar se puede considerar despreciable.

3.2.-) **CALCULO DE LA EMISION POR LA VAPORIZACION DEBIDA A LA DIFERENCIA DE TEMPERATURAS ENTRE EL SUELO Y EL DERRAME:**

Para calcular la emisión, se requiere determinar el calor neto transferido al derrame por parte del medio que lo rodea. La sustancia derramada emplea este calor para vaporizarse, por lo que el gasto másico total se calcula despejando Q_v de la ecuación:

$$q = \Delta H_v Q_v \quad (3.6)$$

donde q es el flujo de calor del medio al derrame en calorías/segundo, ΔH_v es el calor requerido para vaporizar una unidad de masa de sustancia derramada, es decir, su entalpia de vaporización, y Q_v es el gasto másico emitido a la atmósfera por vaporización.

El flujo de calor del medio al derrame proviene de dos fuentes:

- a) Energía del suelo, y
- b) Energía de la atmósfera.

Ambos flujos de calor se presentan por conducción, debido a que el suelo y la atmósfera se encuentran a temperatura atmosférica y en CONTACTO FISICO con el derrame, mientras que el derrame se encuentra a la temperatura de su punto normal de ebullición, que es menor a la atmosférica.

Para facilitar el estudio del flujo de calor, éste se dividirá en dos partes; inicialmente se analizará el flujo de calor del suelo al derrame.

3.2.1.-) CALCULO DE LA TRANSFERENCIA DE MASA DEBIDA A LA ENERGIA PROPORCIONADA DEL SUELO AL DERRAME POR CONDUCCION:

Para iniciar esta cuantificación, se parte de un balance general de energía (cuya deducción se presenta en el apéndice I), que es una forma equivalente de la *segunda ley de difusión de Fick*:

$$\frac{\partial^2 T(z,t)}{\partial z^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T(z,t)}{\partial t} \quad (3.7)$$

Es importante señalar que la ecuación (3.7) es un modelo unidimensional de conducción de calor (únicamente en el eje z) a partir de la superficie del derrame, debido a que el perfil de temperatura vertical varía con el tiempo y con la distancia, mientras que la temperatura en cualquier punto del derrame es homogénea, además de que el espesor del derrame es mucho menor que el espesor del suelo. En esta ecuación, α es la difusividad térmica del suelo que se define como la conductividad térmica entre el producto de su densidad por su calor específico, tiene unidades de: m^2/s , T es la temperatura y t es el tiempo; en este caso particular, la ecuación (3.7) debe resolverse con las siguientes condiciones a la frontera:

$$T(\infty, t) = T_0 \quad (3.7a)$$

$$T(0, t) = T_b \quad (3.7b)$$

$$T(z, 0) = T_0 \quad (3.7c)$$

Estas condiciones señalan que:

- a) La temperatura muy por abajo del derrame a cualquier tiempo es la temperatura atmosférica (T_0),
- b) La temperatura en la interfase suelo-derrame en cualquier momento es la temperatura del punto de ebullición normal de la substancia derramada (T_b), y

- c) Al inicio del derrame, la temperatura a cualquier profundidad por debajo del derrame corresponde a la temperatura atmosférica (T_0).

La solución de la ecuación (3.7) es (ref. 5):

$$\frac{T - T_0}{T_0 - T_b} = \text{fer} \frac{z}{\sqrt{4 \alpha t}} \quad (3.8)$$

Donde fer significa "la función error de".

En el apéndice I, se muestra el método para obtener la ecuación (3.8) a partir de la ecuación (3.7).

Despejando la temperatura T de la ecuación (3.8) se tiene:

$$T = (T_0 - T_b) \text{fer} \frac{z}{\sqrt{4 \alpha t}} + T_b \quad (3.9)$$

La cantidad de calor transferida por unidad de tiempo, es decir, el flujo q en la superficie del derrame ($z = 0$) se obtiene derivando la temperatura obtenida en la ecuación (3.9) con respecto a la distancia:

$$q \Big|_{z=0} = k_s \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{z=0} = k_s \lambda \left(\frac{\partial (T_0 - T_b) \text{fer} \frac{z}{\sqrt{4 \alpha t}} + T_b}{\partial z} \right) \quad (3.10)$$

Por definición (ref. 28): $\text{fer}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\eta e^{-\eta^2} d\eta$ (3.11)

Substituyendo la ecuación (3.11) en la ecuación (3.10), se tiene:

$$q \Big|_{z=0} = k_s \lambda (T_0 - T_b) \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{z}{\sqrt{4 \alpha t}}} e^{-\eta^2 / (4 \alpha t)} d \frac{z}{\sqrt{4 \alpha t}} \right) \quad (3.12)$$

Efectuando la derivada de la ecuación (3.12) se obtiene:

$$q \Big|_{z=0} = k_s A (T_0 - T_B) \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi t}} e^{-z^2/(4 \alpha t)} \right\} \left(\frac{1}{\sqrt{4 \alpha t}} \right) \quad (3.13)$$

Substituyendo en la ecuación (3.13) la condición $z = 0$, la exponencial se vuelve 1, y se obtiene la expresión final para el flujo de calor de la atmósfera a la superficie del derrame:

$$q \Big|_{z=0} = \frac{k_s A (T_0 - T_B)}{\sqrt{\pi \alpha t}} \quad (3.14)$$

donde k_s es la conductividad térmica del suelo con unidades de kcal/[m°C s], A es el área del derrame (se vuelve a considerar un círculo de diámetro L), T_0 es la temperatura de la atmósfera, T_B el punto normal de ebullición, α es el coeficiente de difusividad térmica del suelo y t es el tiempo transcurrido.

Debido a que el derrame se encuentra a una temperatura mucho menor a la del suelo que se encuentra a temperatura ambiente, puede suceder que un manto freático del suelo se congele, transfiriendo calor a la superficie por el cambio de fase; este transporte de calor se realiza verticalmente hacia arriba porque al estar el agua líquida del manto freático a la misma temperatura que el suelo no se transfiere calor hacia abajo o hacia los lados. Así que se considera un factor de corrección D_f llamado *factor de congelamiento* (ref. 6) que tome en cuenta esta aportación adicional de energía, y se tiene:

$$D_f = \left(\frac{T_B}{T_B - T_0} \right) \frac{1}{\text{fer } \lambda} \quad (3.15)$$

La constante numérica λ se calcula de:

$$\frac{c_{ES} T_B}{\Delta H_s \sqrt{\pi t}} - \left(\frac{\exp(-\lambda)^2}{\lambda \operatorname{ferc} \lambda} + \frac{T_o}{T_B} \left[\frac{(k \rho c)_{EL}}{(k \rho c)_{ES}} \right]^{1/2} \exp \left(\frac{\alpha_{ES} \lambda^2}{\alpha_{EL}} \right) \right) \lambda \operatorname{ferc} \left[\lambda \left(\frac{\alpha_{ES}}{\alpha_{EL}} \right)^{1/2} \right] = 1 \quad (3.6)$$

donde ΔH_s el calor latente de solidificación, el subíndice *es* significa en el estado sólido (congelado) y *el* significa en el estado líquido (sin congelar). Todas las propiedades anteriores son del agua, excepto T_B que es el punto de ebullición normal de la sustancia derramada.

Las investigaciones que posteriormente condujeron a la ecuación (3.16), se refieren al fenómeno de solidificación de lava volcánica conocido como problema de Stefan (ref. 32), donde hay una corriente de magma líquida a una temperatura muy elevada que al ir avanzando en contacto con la atmósfera forma una "costra" de roca solidificada en la superficie; el flujo de calor en este caso es vertical de la lava aún líquida a la atmósfera a través de la costra de roca sólida. La constante λ tiene su concepción teórica en el flujo máximo de calor a través del medio poroso.

Experimentalmente se ha comprobado que si la humedad del suelo baja del 8%, el gas licuado puede penetrar en el suelo seco (ref. 7). Consecuentemente, la rapidez de vaporización será mayor que la debida solamente a la energía transferida por conducción del suelo, por lo que se introduce otro coeficiente de corrección *p* llamado coeficiente de percolación (ref. 4 y 7), que tome en cuenta este fenómeno:

$$p = \exp \left(\frac{K^2}{4 \alpha_{SE}} \right) \operatorname{ferc} \left(\frac{K}{2 \sqrt{\alpha_{SE} t}} \right) \quad (3.17)$$

$$\text{donde } K = \left[2 K' \frac{\gamma L}{\mu c} + \xi \frac{1}{\frac{(\rho c)_{SE} (T_o - T_b)}{\rho_L \Delta H_v}} \right]^{1/2}$$

$$\text{y } \xi = \left[\sqrt{\pi} \phi \left(\frac{K}{2 \sqrt{\alpha_{SE}}} \right) \right]^{-1}$$

donde K' es la constante modificada de D'arcy, γ es la tensión superficial, μ la viscosidad, c la porosidad, ϕ la esfericidad y α la difusividad térmica del suelo. El subíndice SE significa "del suelo seco" y L significa "del líquido derramado".

Por lo tanto, introduciendo los factores de corrección definidos en las ecuaciones (3.15) y (3.17) en la ecuación (3.14), la cantidad de energía transferida por conducción del suelo al derrame (en cal/s) es:

$$q_{\text{suelo}} = \frac{D_f K_s A (T_o - T_b)}{p \sqrt{\pi \alpha t}} \quad (3.18)$$

Una vez calculado el flujo de calor (q), la emisión másica (Q) se calcula despejándolo de la ecuación:

$$q = Q \Delta H_v \quad (3.19)$$

donde q es el flujo de calor necesario para vaporizar el gasto másico Q , y ΔH_v es la entalpia de vaporización; substituyendo la ecuación (3.18) en la (3.19) y despejando Q se tiene:

$$Q_{\text{suelo}} = \frac{D_f K_s A (T_o - T_b)}{p \Delta H_v \sqrt{\pi \alpha t}} \quad (3.20)$$

3.2.2.-) **CALCULO DE LA TRANSFERENCIA DE MASA DEBIDA A LA ENERGIA PROPORCIONADA DE LA ATMOSFERA POR CONDUCCION:**

El flujo de calor es directamente proporcional a la diferencia de temperaturas entre la superficie del derrame y la atmósfera, así que:

$$q = h A (T_0 - T_s) \quad (3.21)$$

(ya que se desea que la constante de proporcionalidad h esté por unidad de área A). En la ecuación (3.21) q es el calor transferido de la atmósfera a la superficie del derrame en kcal/s, T_0 es la temperatura atmosférica, T_s es la temperatura del punto normal de ebullición de la substancia derramada, h es la constante de proporcionalidad conocida como: *coeficiente de transferencia de calor* que tiene unidades de kcal/[m² °C s] y A es el área superficial del derrame. El problema aquí es la estimación de h , que debe resolverse experimentalmente.

Siguiendo el procedimiento de análisis dimensional expuesto en el capítulo II, se desea conocer la relación entre el coeficiente de transferencia de calor por convección h y las siguientes variables:

- a) Conductividad térmica del aire, k_a ,
- b) Longitud del derrame en la dirección del viento, L , (su diámetro porque se considera que el derrame es de forma circular).
- c) Velocidad del viento a nivel de piso, v ,
- d) Viscosidad absoluta del aire, μ ,
- e) Densidad del aire, ρ ,
- f) Calor específico del aire, c .

Todas las variables involucradas son entonces ocho: Coeficiente de transferencia de calor, conductividad térmica,

viscosidad, densidad, calor específico y velocidad a nivel de piso del aire, longitud del derrame en la dirección del viento y una constante dimensional que relaciona unidades mecánicas y térmicas (ref. 11). Las magnitudes de todas estas variables son cinco: Energía (H), longitud (L), tiempo (T), temperatura (θ) y masa (M).

Por el teorema de Buckingham, el número de grupos adimensionales que se encontrarán relacionando las variables anteriores es el número de variables (8) menos las magnitudes involucradas (5): $8-5 = 3$.

Y se obtiene una relación de la forma:

$$\text{Nu} = C \text{Pr}^a \text{Re}^b \quad (3.22)$$

donde Nu es el número de Nusselt = $h L/k_s$, Pr el número de Prandtl = $\mu c/k_s$, y por último Re es el número de Reynolds definido en el capítulo II como $\rho v L/\mu$

Para obtener el valor del número de Nusselt (Nu) experimentalmente, no es práctico correr experimentos con todos los líquidos y bajo una variedad infinita de condiciones. Por ejemplo, Nu diferirá para un mismo peso de líquido que absorba idénticas cantidades de calor cuando los valores numéricos de t_1 y t_2 difieran, puesto que las propiedades del líquido están relacionadas a esas temperaturas. Otros factores que afectan la experimentación son aquellos encontrados en el análisis dimensional, tales como la velocidad del líquido y el diámetro del tubo a través del que ocurre la transferencia de calor. Es aquí, donde la importancia de las ecuaciones obtenidas mediante el análisis dimensional se hace evidente. Si los valores de los exponentes y coeficientes de las ecuaciones adimensionales para condiciones extremas de operación son establecidos mediante experimentos, el valor de Nu puede ser calculado para cualquier combinación intermedia de velocidad, tubería y propiedades del líquido, a partir de la ecuación dada (ref. 10).

Un aparato típico para la determinación del número de Nusselt para líquidos que fluyen dentro de tuberías o tubos, se muestra en la figura 3.2. La parte principal del sistema es un intercambiador de calor que calienta o enfría un líquido con aire para tener una simulación del proceso de transferencia de calor que ocurre en la realidad; conociendo la velocidad del aire, y las propiedades fisicoquímicas y termodinámicas tanto del aire como del líquido se obtienen diferentes valores del número de Prandtl y de Reynolds para obtener los valores numéricos C_f , ϵ y ν de la ecuación (3.22), siguiendo el método gráfico expuesto en el capítulo II. Así que se obtienen las correlaciones obtenidas por Pohlhausen (ref. 24) para número de Prandtl > 0.5 :

$$Nu = 0.332 Pr^{1/3} Re^{1/2} \quad (3.23)$$

para régimen laminar (número de Reynolds $< 320,000$)

$$Nu = 0.0296 Pr^{1/3} Re^{1/2} \quad (3.24)$$

para régimen turbulento (número de Reynolds $> 320,000$).

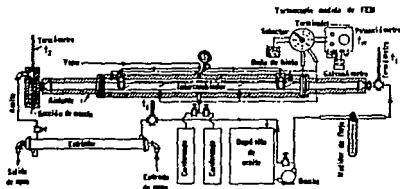


Fig. 3.2.- Aparato para la determinación de Nu (Ref. 10)

Siguiendo el procedimiento para obtener un coeficiente de transferencia de calor promedio \bar{h} desarrollado en el capítulo II, se obtienen las correlaciones siguientes para número de Nusselt promedio (\bar{Nu}):

$$\bar{Nu} = 0.664 \text{ Pr}^{1/3} \text{ Re}^{1/2} \quad (3.25)$$

para régimen laminar (número de Reynolds $< 320,000$)

$$\bar{Nu} = 0.037 \text{ Pr}^{1/3} (\text{Re}^{0.8} - 15200) \quad (3.26)$$

para régimen turbulento (número de Reynolds $> 320,000$).

Despejando el coeficiente de transferencia de calor promedio (\bar{h}) de la definición de número de Nusselt, se tiene:

$$\bar{h} = \bar{Nu} \frac{k_a}{L} \quad (3.27)$$

El número de Nusselt promedio (\bar{Nu}) se obtiene con las ecuaciones (3.25) o (3.26) dependiendo del régimen de flujo. Substituyendo la ecuación (3.27) en la ecuación (3.21) se obtiene:

$$q = \bar{Nu} \frac{k_a}{L} A (T_o - T_s) \quad (3.28)$$

donde q es la transferencia de calor por conducción del aire al derrame. Por la ecuación (3.19), el gasto másico emitido a la atmósfera es el calor transferido dividido entre la entalpía de vaporización de la substancia derramada, por lo que el gasto másico emitido a la atmósfera debido al calor transferido por conducción del aire al derrame es:

$$Q_{\text{aire}} = \frac{k_a}{\Delta H_v} \bar{Nu} \frac{A}{L} (T_o - T_s) \quad (3.29)$$

3.2.3.-) CALCULO DE LA TRANSFERENCIA DE MASA TOTAL POR CONDUCCION:

La transferencia de masa total a la atmósfera es la suma de la vaporización con la energía proporcionada del suelo y de la atmósfera por conducción:

$$Q_c = Q_{\text{suelo}} + Q_{\text{aire}} \quad (3.30)$$

por lo tanto, substituyendo las ecuaciones (3.20) y (3.29) en la ecuación (3.30), se tiene:

$$Q_c = \frac{D_f k_a A (T_o - T_B)}{p \Delta H_v \sqrt{\pi \alpha t}} + \frac{k_a}{\Delta H_v} Nu \frac{A}{L} (T_o - T_B) \quad (3.31)$$

Se puede observar la dependencia del primer sumando de la ecuación (3.31) con el tiempo. Para determinar la cantidad total de sustancia evaporada entre un tiempo t_o y cualquier otro tiempo posterior t , se efectúa la integración de la ecuación (3.31) entre los límites t_o y t :

$$m_e \Big|_{t_o}^t = \int_{t_o}^t \frac{dm}{dt} dt = \int_{t_o}^t Q_c dt$$

$$m_e \Big|_{t_o}^t = \frac{2 D_f k_a A (T_o - T_B)}{p \Delta H_v \sqrt{\pi \alpha t}} \left[\sqrt{t} - \sqrt{t_o} \right] + \frac{k_a}{\Delta H_v} Nu \frac{A}{L} (T_o - T) (t - t_o) \quad (3.32)$$

Por otro lado, al estar expuesto el derrame a la acción del viento que sopla sobre su superficie, existe una transferencia de masa por convección forzada del derrame a la atmósfera que está definida por la ecuación (2.37) y (2.41):

$$Q_v = D \overline{Sh} \frac{A}{L} \rho_v \quad (3.33)$$

donde Q_v es la emisión en masa/tiempo, D es el coeficiente de difusión de la sustancia derramada en aire, A es el área superficial y L el diámetro del derrame, ρ_v es la densidad del vapor saturado a presión y temperatura atmosféricas y \overline{Sh} es el número de Sherwood promedio que se calcula con la ecuación (2.34) para régimen laminar o la ecuación (2.36) para régimen turbulento.

Como se puede observar en la figura 3.3, el comportamiento de la ecuación (3.31) es decreciente con el tiempo hasta llegar a una asíntota horizontal (el segundo sumando de la ecuación (3.31) es independiente del tiempo), mientras que la ecuación (3.33) es una línea recta independiente del tiempo.

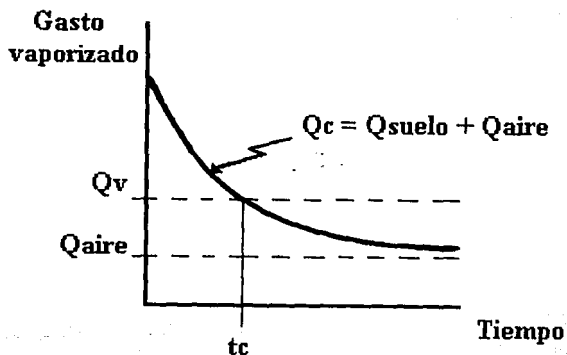


Fig. 3.3.- Comportamiento de las ecuaciones de transferencia de masa.

3.3.-) **CÁLCULO DEL TIEMPO EN QUE ES PREDOMINANTE LA TRANSFERENCIA DE MASA DEBIDA A DIFERENCIAS DE TEMPERATURA (t_c).**

El punto de cruce de las líneas de la figura 3.3 corresponde al momento en que la emisión debida a diferencias de temperatura y a convección forzada del viento se vuelven iguales, por lo que este tiempo es el que marca el cambio en las predominancias. A partir de ese momento es mayor la transferencia de masa por convección forzada, y la transferencia por diferencia de temperaturas se vuelve cada vez menor. Para obtenerse analíticamente se igualan las ecuaciones (3.20) y (3.24) porque el tiempo correspondiente al punto de cruce es común a ambas ecuaciones:

$$\frac{D r k_s A (T_o - T_b)}{p \Delta H_v \sqrt{\pi \alpha t}} + \frac{k_a}{\Delta H_v} \overline{Nu} \frac{A}{L} (T_o - T_b) = D \overline{Sh} \frac{A}{L} \rho_v$$

Y se despeja el tiempo t :

$$t_c = \frac{1}{\pi \alpha} \left(\frac{k_s A (T_o - T_b)}{\Delta H_v \left[D \overline{Sh} \frac{A}{L} \rho_v - \frac{k_a}{\Delta H_v} \overline{Nu} \frac{A}{L} (T_o - T_b) \right]} \right)^2 \quad (3.34)$$

3.4.-) **CÁLCULO DE LA EMISIÓN POR CONVECCIÓN FORZADA:**

A partir del tiempo anteriormente dado, todo el material vaporizado es por convección forzada, y se calcula por la ecuación (3.33):

$$Q_v = D \overline{Sh} \frac{A}{L} \rho_v \quad (3.33)$$

Como se dijo anteriormente, Q_v es la emisión en masa/tiempo, D es el coeficiente de difusión de la substancia derramada en aire, A es el área superficial y L el diámetro del derrame, ρ_v es

la densidad del vapor saturado a presión y temperatura atmosféricas y \overline{Sh} es el número de Sherwood promedio que se calcula con la ecuación (2.34) para régimen laminar o la ecuación (2.36) para régimen turbulento.

Para aclarar los diferentes mecanismos involucrados en la vaporización de un gas licuado derramado, es conveniente estudiar por separado cuatro casos ilustrativos donde X^* es la fracción de vapor que se produce en la vaporización instantánea:

a) $X^* \geq 1.0$: Esto implica que todo el material liberado se vaporiza por la disminución de la presión sin producir un derrame en el suelo, hasta que la fuga se controla; por lo tanto, el gasto que se vaporiza (Q_1) es la masa total vaporizada dividida entre un tiempo prefijado de un minuto, es importante indicar que $X^* > 1$ no tiene significado físico pero puede obtenerse por el procedimiento matemático. El balance de masa es:

$$m_0 = (Q_1) (\text{tiempo que dura el derrame})$$

b) $0 \leq X^* < 1.0$, y $t_c \leq 1 \text{ min}$: Estas condiciones significan que al liberarse la sustancia, una parte se vaporiza instantáneamente en un tiempo entre 0 y t_c (tiempo que deja de ser predominante la transferencia de masa por diferencia de temperaturas y empieza a ser importante la vaporización por convección forzada), mientras que entre el tiempo t_c y el momento en que cesa la emisión, el mecanismo de vaporización es por convección forzada. La cantidad total de material derramado (m_0) es la suma del gasto vaporizado instantáneamente (Q_1) por un minuto, más el gasto vaporizado por convección forzada (Q_v) por el tiempo desde un minuto hasta que el derrame cesa, es decir:

$$m_0 = Q_1 (t_c) + Q_v (t_1 - t_c)$$

Por lo que el tiempo de terminación puede despejarse y se obtiene la ecuación:

$$t_1 = \frac{m_0 - Q_1 (t_c)}{Q_1} + t_c$$

c) $0 \leq X^* < 1.0$, y $t_c > t_1$: Esto significa que al liberarse el material, una parte se vaporiza instantáneamente hasta $t = t_1$, mientras que entre t_1 y t_c hay una vaporización por diferencia de temperaturas; entre t_c y el tiempo en que cesa el derrame, existe una vaporización por convección forzada. El tiempo t_1 es cero cuando la cantidad de masa vaporizada entre 0 y un minuto (que se calcula con la ecuación (3.33)) es mayor o igual que el producto del gasto másico por vaporización instantánea (que se calcula con la ecuación (3.5)) por un minuto, es decir:

$$m_0 \left| \begin{array}{l} t \\ t_0 \end{array} \right. \geq (Q_1) (1 \text{ minuto}) \rightarrow t_1 = 0$$

mientras que t_1 es un minuto si la cantidad de masa vaporizada entre 0 y un minuto es menor que el producto del gasto másico por vaporización instantánea, es decir:

$$m_0 \left| \begin{array}{l} t \\ t_0 \end{array} \right. < (Q_1) (1 \text{ minuto}) \rightarrow t_1 = 1 \text{ minuto}$$

Haciendo un balance, la cantidad total de substancia derramada (m_0) es la suma del gasto vaporizado instantáneamente (Q_1) multiplicado por t_1 más la cantidad total de substancia vaporizada debida a la transferencia de calor entre el suelo, la atmósfera y el derrame (m_e) desde t_1 hasta el tiempo de cambio (definida en la ecuación (3.34)) más el gasto de vaporización por convección forzada multiplicado por el tiempo que transcurre desde el tiempo de cambio (t_c) y el tiempo en que la emisión a la atmósfera cesa (t_1), su expresión es:

$$m_0 = Q_1 t_1 + m_e \left| \begin{array}{l} t_c \\ t_1 \end{array} \right. + Q_v (t_1 - t_c) \quad (3.35)$$

Por lo tanto, el tiempo en que la vaporización cesa (t_1)

puede conocerse despejándose de la ecuación anterior (3.35) y se obtiene:

$$t_1 = \frac{m_0 - Q_1 t_1 - m_e}{Q_v} \Big|_{t_1}^{t_0} + t_0$$

d) $0 < X^* < 1.0$, pero no hay transferencia de masa: Cuando la vaporización de la sustancia debida a la energía proporcionada por el suelo y la atmósfera por conducción más el gasto másico vaporizado instantáneamente es mayor que la cantidad total derramada, no hay vaporización por convección forzada, por lo que habrá una vaporización instantánea entre cero y un minuto, para después dar lugar a una emisión debida a la energía proporcionada por el suelo y la atmósfera por conducción hasta que la emisión cese. Este momento puede calcularse a partir del siguiente balance:

$$m_0 = (Q_1) (1 \text{ minuto}) + m_e \Big|_{\text{un minuto}}^{t_1} \quad (3.36)$$

desarrollando los términos de la ecuación (3.36) se tiene:

$$\left[\frac{k_a}{\Delta H_v} Nu \frac{A}{L} (T_0 - T_B) \right] t_1 + \left[\frac{2 k_a A (T_0 - T_B)}{\Delta H_v \sqrt{\pi \alpha}} \right] \sqrt{t_1} -$$

$$\left[m_0 - Q_1 (1 \text{ min}) + \frac{2 k_a A (T_0 - T_B)}{\Delta H_v \sqrt{\pi \alpha}} \sqrt{1 \text{ min}} + \frac{k_a}{\Delta H_v} Nu \frac{A}{L} (T_0 - T_B) (1 \text{ mi}$$

que tiene la forma: $a t_1 + b \sqrt{t_1} - c = 0$, así que la solución es:

$$t_1 = \left[\frac{-b + \sqrt{b^2 + 4 a c}}{2 a} \right]^2$$

donde $a = \frac{k_a}{\Delta H_v} Nu \frac{A}{L} (T_0 - T_B)$; $b = \frac{2 k_a A (T_0 - T_B)}{\Delta H_v \sqrt{\pi \alpha}}$; y

$$c = m_0 - Q_1 (1 \text{ min}) + \frac{2 k_a A (T_0 - T_B)}{\Delta H_v \sqrt{\pi \alpha}} \sqrt{1 \text{ min}} + \frac{k_a}{\Delta H_v} Nu \frac{A}{L} (T_0 - T_B) (1$$

CAPITULO IV.

ESTIMACION DE PROPIEDADES FISICOQUIMICAS Y TERMODINAMICAS.

Debido a que es imposible tener una base de datos con las propiedades de TODOS los compuestos que se podrian requerir y a TODAS las temperaturas y presiones posibles , se exponen los métodos más adecuados para predecir las propiedades fisicoquímicas y termodinámicas de las diferentes sustancias que intervienen en el modelo, a partir de datos que puedan obtenerse o medirse fácilmente, además de mostrar la dependencia de ellas con la presión y la temperatura que en algunos casos es muy notable, ya que las interpolaciones entre datos contiguos de tablas son fuente de considerable error.

4.1.-) PROPIEDADES DEL AIRE:

En el presente modelo, el aire es el fluido que transporta a la sustancia derramada y por ser tan común, sus propiedades se predicen en un apartado especial. Las propiedades del aire que deben estimarse son:

- a) Densidad,
- b) Viscosidad,
- c) Conductividad térmica,
- d) Calor específico.

4.1.1.-) ESTIMACION DE LA DENSIDAD:

Debido a que el aire es un gas en condiciones aproximadamente

normales, puede emplearse la ecuación del gas ideal para estimar su densidad:

$$PV = nRT \quad (4.1)$$

donde P es la presión atmosférica en atmósferas, V el volumen que ocupa el aire a la temperatura atmosférica T (en °K), n el número de moles del gas a estas condiciones y R la constante del gas ideal; por otro lado el número de moles de un gas puede calcularse como:

$$n = m/M \quad (4.2)$$

donde M es el peso molecular y m la masa del gas. Substituyendo la ecuación (4.2) en la (4.1) y reorganizando términos se tiene:

$$PM = \frac{m}{V} RT = \rho RT \quad (4.3)$$

Por lo tanto, la densidad de un gas (ρ) puede calcularse como:

$$\rho = \frac{PM}{RT} \quad (4.4)$$

4.1.2.-) ESTIMACION DE LA VISCOSIDAD:

Todas las técnicas de estimación de la viscosidad están basadas en la teoría de Chapman-Enskog de la ley de los estados correspondientes; en esta ocasión se empleará el método de Lucas (ref. 14) para la estimación del oxígeno y del nitrógeno para después usar el método de Reichenberg (ref. 22) para obtener la viscosidad de una mezcla de 79% de nitrógeno y 21% de oxígeno.

El método de Lucas requiere los siguientes datos de cada elemento (ref. 23):

	Nitrógeno	Oxígeno
T _c	126.2	154.6
P _c	33.9	50.4
V _c	89.8	73.4
M	28.013	31.999
d	0.0	0.0

donde T_c es la temperatura crítica en K, P_c la presión crítica en bares, V_c el volumen crítico en cm³/gmol, M el peso molecular y d el momento dipolar en debyes.

4.1.2.1.-) **CALCULO DE LA VISCOSIDAD DE LOS GASES INDIVIDUALES (OXIGENO Y NITROGENO):**

a) Se calcula la temperatura reducida como la temperatura atmosférica en grados kelvin entre la temperatura crítica,

b) Se calcula un momento dipolar adimensional (d_r) con la siguiente fórmula:

$$d_r = 52.46 \frac{d^2 P_c}{T_c^2} \quad (4.5)$$

c) A continuación se calcula el factor F_p^o que corrige por posible polaridad de las moléculas:

$$\begin{aligned}
 F_p^o &= 1 && \text{SI} && 0 \leq d_r < 0.022 \\
 F_p^o &= 1 + 30.55(0.292 - Z_c)^{1.72} && \text{SI} && 0.022 \leq d_r < 0.075 \\
 F_p^o &= 1 + 30.55(0.292 - Z_c)^{1.72} |0.96 + 0.1(T_r - 0.7)| && \text{SI} && 0.075 \leq d_r
 \end{aligned}$$

d) Posteriormente se calcula una variable ξ con la ecuación:

$$\xi = 0.176 \left(\frac{T_c}{M^2 P_c^4} \right)^{1/6} \quad (4.6)$$

e) Por último se despeja la viscosidad μ de la ecuación:

$$\mu\xi = [0.807 Tr^{0.618} - 0.357 \exp(-0.449 Tr) + 0.340 \exp(-4.058 Tr) + 0.018] F_p^2 \quad (4.7)$$

De la ecuación (4.7) se obtiene la viscosidad en micropoises (μP).

4.1.2.1.-) CALCULO DE LA VISCOSIDAD DE LA MEZCLA DE NITROGENO - OXIGENO:

a) Se obtiene una temperatura reducida conjunta:

$$T_{r12} = \frac{T}{(T_{c1} T_{c2})^{1/2}} \quad (4.8)$$

donde T_{c1} es la temperatura crítica del componente 1 y T es la temperatura atmosférica.

b) Se calcula una variable U del componente 1:

$$U_1 = \frac{[1 + 0.36 Tr_1 (Tr_1 - 1)]^{1/6} F_{R1}}{(Tr_1)^{1/2}} + \frac{Tr_1^{3.5} + 10^7 \mu_{r1}^7}{Tr_1^{3.5} (1 + 10^7 \mu_{r1}^7)} \quad (4.9)$$

donde Tr_1 es la presión reducida del componente 1 y F_{R1} es un factor de corrección polar que en este caso, por tratarse de elementos no polares es 1; Tr_1 es la temperatura reducida del componente 1, que se obtiene dividiendo la temperatura atmosférica entre la temperatura crítica y μ_{r1} es la viscosidad reducida del componente 1.

c) Se calcula la contribución estructural (C) del componente 1:

$$C_1 = \frac{M_1^{1/4}}{(\mu_1 U_1)^{1/2}} \quad (4.10)$$

donde μ_1 es la viscosidad obtenida en el inciso 4.1.2.1.-), U es el parámetro obtenido con la ecuación (4.9), y M el peso molecular del componente i .

d) Se calcula una variable H de la mezcla de gases:

$$H_{12} = \left[\left(\frac{M_1 M_2}{(32 M_1 M_2)^3} \right)^{1/2} (C_1 + C_2)^2 \right] \left[\frac{[1 + 0.36 T_{r12}(T_{r12} - 1)]^{1/6}}{(T_{r12})^{1/2}} \right] \quad (4.11)$$

donde M_1 es el peso molecular y C la contribución estructural del componente i , T_{r12} es la temperatura reducida conjunta calculada con la ecuación (4.8).

e) Se calcula una variable K del componente i :

$$K_1 = \frac{y_1 \mu_1}{y_1 + \mu_1 \{y_j H_{12} [3 + (2 M_j/M_1)]\}} \quad (4.12)$$

donde y_1 es la fracción molar del gas i , mientras que $y_j = 1 - y_1$, es decir, la fracción molar del otro componente; μ_1 es la viscosidad del componente i , H_{12} la variable obtenida en la ecuación (4.11), M_i es el peso molecular del componente i y M_j el del otro componente.

f) Por último, la viscosidad de la mezcla se calcula de:

$$\mu_{12} = K_1(1 + H_{12}^2 K_2^2) + K_2(1 + 2 H_{12} K_1 + H_{12}^2 K_1^2) \quad (4.13)$$

4.1.3.-) ESTIMACION DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA:

Es difícil establecer la dependencia de la conductividad térmica con la temperatura, sin embargo Miller et al. (ref. 16) han propuesto relaciones polinomiales para ciertos gases; para oxígeno y nitrógeno tales relaciones son:

4.1.3.1.-) ESTIMACION DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA DEL OXIGENO Y DEL NITROGENO:

a) Para oxígeno:

$$k_o = -3.273 \cdot 10^{-4} + 9.966 \cdot 10^{-5} T - 3.743 \cdot 10^{-8} T^2 + 9.732 \cdot 10^{-12} T^3 \quad (4.14)$$

b) Para nitrógeno:

$$k_N = 3.919 \cdot 10^{-4} + 9.813 \cdot 10^{-5} T - 5.067 \cdot 10^{-8} T^2 + 1.504 \cdot 10^{-11} T^3 \quad (4.15)$$

donde T está en grados kelvin y la conductividad térmica en W/(m²·K)

4.1.3.2.-) ESTIMACION DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA DE LA MEZCLA OXIGENO - NITROGENO:

a) Se determina el parámetro A_{ij} según el método modificado de Mason y Saxena (ref. 15) como:

$$A_{ij} = \frac{[1 + (k_{r1}/k_{rj})^{1/2} (M_i/M_j)^{1/4}]^2}{[8(1 + M_i/M_j)]^{1/2}} \quad (4.16)$$

donde k_{ri} es el valor monoatómico de la conductividad térmica, y M_i el peso molecular del componente i. Pero se sabe que:

$$\frac{k_{r1}}{k_{rj}} = \frac{\mu_1}{\mu_j} \frac{M_j}{M_i}$$

donde μ_i es la viscosidad del componente i calculada con la ecuación (4.7),

b) La conductividad térmica se obtiene de la ecuación:

$$k_a = \sum_{i=1}^n \frac{y_i k_i}{\sum_{j=1}^n y_j A_{ij}} \quad (4.17)$$

donde y_i es la fracción mol y k_i la conductividad térmica del componente i , A_{ij} es la función calculada con la ecuación (4.15), con la salvedad de que $A_{ii} = A_{jj} = 1.0$.

4.1.4.-) ESTIMACION DEL CALOR ESPECIFICO:

M.T. Fleisher (ref. 6) presenta la siguiente correlación para la estimación del calor específico del aire:

$$c = (A + BT + CT^2) R$$

donde c es el calor específico y las constantes A , B , C y R son:

$$A = 3.5915209490$$

$$B = 7.044736842 \cdot 10^{-4}$$

$$C = 1.396542828 \cdot 10^{-6}$$

$$R = 0.0686042$$

La temperatura está en grados kelvin.

4.2.-) PROPIEDADES DE LA SUBSTANCIA DERRAMADA:

La sustancia que sale de su contenedor y se vaporiza a la atmósfera puede ser de naturaleza muy diversa, así que debe considerarse que es muy polar para estimar en el peor de los casos, en donde las interacciones atómicas son máximas. Las propiedades que deben estimarse en este caso son:

- a) Densidad del vapor saturado,
- b) Densidad del líquido,
- c) Coeficiente de difusión de la sustancia en el aire,
- d) Entalpia de vaporización,
- e) Entalpia del líquido saturado a diferentes condiciones de presión y temperatura.

4.2.1.-) ESTIMACION DE LA DENSIDAD DEL VAPOR SATURADO:

Si no se conoce el valor de la densidad, se puede emplear la ecuación del gas ideal, de tal forma que:

$$\rho_v = P M / (R T_r) \quad (4.18)$$

Las variables son las indicadas en la ecuación (4.1), excepto T_r , ya que todas las propiedades del vapor saturado son evaluadas a la temperatura de la película superficial del derrame T_r que debe estar entre la temperatura de la superficie del derrame y la atmosférica, así que se toma como el promedio de la temperatura ambiente y el punto de ebullición normal de la sustancia.

La densidad obtenida en la ecuación (4.17) puede variar mucho del valor real cuando la sustancia en estudio es polar como en el caso de etanol o metanol, porque la ley del gas ideal considera que no existen interacciones entre las moléculas del gas y en una sustancia polar hay atracciones entre dipolos (del tipo de puentes de hidrógeno), en estos casos es más conveniente calcular la densidad con una ecuación de estado que represente más adecuadamente los datos experimentales; para ello se introduce en la ecuación (4.17) un factor de corrección llamado *factor de compresibilidad* (Z):

$$\rho_v = P M / (Z R T_r) \quad (4.19)$$

La ecuación de Soave se emplea comúnmente en Ingeniería para calcular el factor de compresibilidad (se observa que cuando $Z=1$,

el gas se comporta idealmente). El procedimiento es el siguiente:

- a) Se calculan las siguientes constantes para cada gas:

$$a = \frac{0.42748 R^2 T_c^2}{P_c} [1 + \omega (1 - T_r^{1/2})]^2$$

$$b = \frac{0.086647 R T_c}{P_c} \quad (4.20)$$

donde $\omega = 0.48 + 1.574 \omega - 0.17 \omega^2$, ω es el factor acéntrico de la sustancia, T_c y P_c son la temperatura y presión críticas de la sustancia respectivamente (constantes para cada sustancia).

La constante a tiene como fin explicar las fuerzas de atracción entre las moléculas, que hacen que la presión sea menor que la que ejercería un gas ideal, mientras que la constante b tiene como fin dar margen para el tamaño finito de las moléculas, lo cual hace que el volumen sea mayor que el de un gas ideal.

- b) A una presión (P) y temperatura (T) dadas, se calculan las constantes para la ecuación de Soave (a partir de las constantes (4.19):

$$A^* = \frac{b P}{R^2 T^2} \quad \text{y} \quad B^* = \frac{b P}{R T} \quad (4.21)$$

donde R es la constante del gas ideal = $83.14 \text{ cm}^3/(\text{gmol K})$

- c) Se calcula el factor de compresibilidad Z resolviendo la siguiente ecuación:

$$Z^3 - (1 + B^* - u B^*) Z^2 + (A^* + v B^{*2} - u B^* - u B^{*2}) Z - A^* B^* - v B^{*2} - u B^{*2} = 0 \quad (4.22)$$

donde para la ecuación de Soave, $u = 1$ y $v = 0$

4.2.2.-) ESTIMACION DE LA DENSIDAD DEL LIQUIDO.

De la ref. 23, se obtiene una correlación para obtener el volumen molar específico del líquido saturado en su punto de ebullición normal:

$$V_b = 0.285 V_c^{1.048} \quad (4.23)$$

donde V_c es el volumen crítico y V_b es el volumen específico molar del líquido saturado, ambos en cm^3/gmol , la densidad se puede calcular de:

$$\rho_l = \frac{M}{V_b} * 1000 \quad (4.24)$$

donde M es el peso molecular del líquido y ρ_l la densidad en gramos/litro.

4.2.3.-) ESTIMACION DEL COEFICIENTE DE DIFUSION DEL VAPOR DE LA SUBSTANCIA DERRAMADA EN AIRE:

Muchos métodos han sido propuestos para la estimación de los coeficientes de difusión, sin embargo Wilke y Lee (ref. 34) sugieren un método general que contiene constantes empíricas:

$$D = \frac{[3.03 - (0.98/M_{12}^{1/2})](10^{-3}) T^{3/2}}{P M_{12}^{1/2} \sigma_{12}^2 \Omega_D} \quad (4.25)$$

donde D es el coeficiente de difusión en cm^2/s , T es la temperatura atmosférica en grados kelvin, M_1 y M_2 son los pesos moleculares de la sustancia derramada y del aire, $M_{12} = 2 [(1/M_1) + (1/M_2)]^{-1}$ y P es la presión atmosférica en bares. El parámetro σ_{12} se calcula de: $\sigma_{12} = (\sigma_1 + \sigma_2)/2$, mientras que $\sigma_1 = 1.18 V_{b1}^{1/3}$ donde V_{b1} es el volumen molar del líquido i en cm^3/mol , en el caso del aire, $\sigma_{\text{aire}} = 3.62 \text{ \AA}$. Es importante indicar que el parámetro Ω_D es el más difícil de estimar y se conoce como *integral de colisión*, y se calculará con la relación de Neufield

et al. (ref. 17):

$$\Omega_D = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(D T^*)} + \frac{E}{\exp(F T^*)} + \frac{G}{\exp(H T^*)} \quad (4.26)$$

donde $T^* = (k/c_{12}) T$, siendo T la temperatura atmosférica absoluta, k/c_{12} se calcula con la ecuación:

$$c_{12}/k = [(c_1/k)(c_2/k)]^{1/2} \quad (4.27)$$

donde k es la constante de Boltzmann; para el caso del aire, $c/k = 97.0$ K; para la otra substancia $c/k = 1.15 T_b$, donde T_b es su temperatura norma de ebullición. Las constantes A, B, C, D, E, F, G y H tienen los valores:

A = 1.06036
 B = 0.15610
 C = 0.19300
 D = 0.47635
 E = 1.03587
 F = 1.52996
 G = 1.76474
 H = 3.89411

4.2.4.-) ESTIMACION DE LA ENTALPIA DE VAPORIZACION EN EL PUNTO NORMAL DE EBULLICION:

Vetere (ref. 33) propone una ecuación para calcular la entalpia de vaporización a partir de datos críticos de la substancia derramada:

$$\Delta H_v = R T_c T_{br} \frac{0.4343 \ln P_c - 0.69431 + 0.89584 T_{br}}{0.37691 - 0.37306 T_{br} + 0.15075 P_c^{-1} T_{br}^{-2}} \quad (4.28)$$

donde P_c es la presión crítica en bares, T_c la temperatura crítica

en grados kelvin, R la constante del gas ideal y T_{br} la temperatura de ebullición normal reducida, es decir dividida entre la temperatura crítica.

4.2.5.-) ESTIMACION DE LA ENTALPIA DE LIQUIDO SATURADO

Es posible estimar entalpias de sustancias puras a partir de ecuaciones de estado como la ecuación de Peng-Robinson (ref. 23) que estima entalpias a partir de propiedades críticas:

$$\Delta H = - \left(\frac{a}{2 b \sqrt{2} T} + \frac{T}{2 b \sqrt{2} T} \frac{\partial a}{\partial T} \right) \ln \frac{Z - 0.414 B^*}{Z + 2.414 B^*} - [R T (Z - 1)] \quad (4.29)$$

donde las constantes a y b se calculan con las ecuaciones (4.20), el coeficiente de fugacidad Z con el procedimiento explicado en el inciso 4.2.1.-), T es la temperatura absoluta a la que se encuentra el líquido, R es la constante del gas ideal y B^* es una variable que se calcula con la correlación $B^* = (b P) / (R T)$, donde P es la presión a la que se encuentra el líquido. La derivada parcial $\partial a / \partial T$ se calcula con la siguiente correlación:

$$\frac{\partial a}{\partial T} = - R \omega \left(\frac{0.42748 a T_c}{T P_c} \right)^{1/2} \quad (4.30)$$

donde $\omega = 0.48 + 1.574 \omega - 0.17 \omega^2$, ω es el factor acéntrico de la sustancia, T es la temperatura y P la presión a la que se encuentra la sustancia, P_c y T_c la presión y temperatura críticas.

4.3.-) PROPIEDADES DEL SUELO:

Para evitar diferentes puntos de vista en cuanto a las propiedades de cada determinado tipo de suelo, para el presente modelo se ha considerado que el suelo tiene una humedad del 15% (ref. 1) y una estructura arenosa, por lo que sus propiedades se consideraron con los siguientes valores:

	Suelo seco	Suelo húmedo
k	0.32	2.21
ρ_s	1640.0	1880.0
c	800.0	1240.0
α	$2.581 \cdot 10^{-7}$	$7.742 \cdot 10^{-7}$

donde k es la conductividad térmica en $W/(m \cdot ^\circ C)$, ρ_s es la densidad en kg/m^3 , c es el calor específico en $J/(kg \cdot ^\circ C)$ y α es la difusividad térmica en m^2/s .

Es importante indicar que las propiedades del suelo húmedo puede determinarse con las correlaciones:

4.3.1.-) ESTIMACION DE LA DENSIDAD DEL SUELO HUMEDO:

$$\rho_{SH} = \rho_{SE} (1 + w) \quad (4.31)$$

donde ρ_{SE} es la densidad del suelo seco, ρ_{SH} es la densidad del suelo húmedo y w el porciento de humedad en el suelo.

4.3.2.-) ESTIMACION DEL CALOR ESPECIFICO DEL SUELO HUMEDO:

$$c_{SH} = \frac{c_{SE} + w c_{agua}}{1 + w} \quad (4.32)$$

donde c es el calor específico del suelo húmedo, c_{SE} el calor específico del suelo seco, c_{agua} el calor específico del agua líquida o sólida según el estado en que se encuentre en el suelo y w el porciento de humedad.

4.3.3.-) ESTIMACION DEL CALOR LATENTE DE SOLIDIFICACION DEL AGUA:

$$\Delta H_s = 335000 \frac{w}{1 + w} \quad (4.33)$$

donde ΔH_s es el calor latente de solidificación del agua en J/kg y

w el porciento de humedad en el suelo.

4.3.4.-) ESTIMACION DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA DEL SUELO HUMEDO:

$$K_{SH} = (0.1424 \log w + 0.3267) 10^{0.000624} \rho_{SE} \quad (4.34)$$

donde K_{SH} es la conductividad térmica del suelo húmedo, w es el porcentaje de humedad del suelo y ρ_{SE} la densidad del suelo seco.

CAPITULO V.

APLICACION DEL MODELO.

En este capítulo se muestra una forma de emplear los conceptos expuestos en los capítulos precedentes para calcular la emisión de sustancias derramadas en diferentes condiciones; a través de un programa de computadora se presentan los resultados de diferentes maneras para posteriormente compararse con una ecuación empírica desarrollada por Sutton (en el apéndice III se lista el código del programa completo). El programa de computadora se realizó en el compilador de un lenguaje de alto nivel: Quickbasic versión 4.5; las razones para emplear este lenguaje fueron:

- a) Las versiones del sistema operativo MS-DOS 5.0 y posteriores tienen integrado el traductor de este lenguaje.
- b) Los comandos de este lenguaje son semejantes al inglés, y por ello entendibles con relativa facilidad,
- c) Los mecanismos del editor para depurar los programas son muy eficientes,
- d) En contraste con los lenguajes de programación orientada a objetos (como el visualbasic) es didáctico escribir la secuencia del programa y no se salta en ventanas de sucesos.

5.1.-) ALGORITMO DEL PROGRAMA DE COMPUTADORA:

El algoritmo del programa está dividido en tres partes para su mejor estudio:

- a) Algoritmo inicial
- b) Cálculo del primer caso (emisión del derrame de un líquido)
- c) Cálculo del segundo caso (emisión del derrame de un gas licuado).

5.1.1.-) ALGORITMO INICIAL:

Aquí se contempla la parte del programa que lo inicia, presenta los menús principales y toma la decisión de mandar el flujo al cálculo correspondiente.

5.1.2.-) CALCULO DEL PRIMER CASO:

Si la temperatura de ebullición normal de la substancia derramada es mayor que la temperatura atmosférica, se forma el espejo de un derrame de diámetro L , que al ser bloqueada la fuga, va disminuyendo; en este caso, los problemas son obtener los diámetros en función del tiempo, y con ellos el gasto másico de vaporización.

5.1.3.-) CALCULO DEL SEGUNDO CASO:

Si la temperatura de ebullición de la substancia derramada es menor que la temperatura atmosférica, significa que la substancia estaba almacenada a alta presión en forma líquida; en este caso se presentará una vaporización instantánea por caída de presión, flujos de calor que producirán la emisión, y vaporización por convección forzada. El modelo considera factores de corrección si el suelo tiene mantos freáticos que pudieran congelarse (factor de congelamiento) o si es muy poroso y pudiera absorber parte del líquido derramado (factor de percolamiento); para esta simulación se consideró que el suelo era impermeable y que por ello no tenía agua subterránea, es decir, que los factores de corrección antes mencionados son iguales a uno, porque es muy difícil prever las

condiciones del suelo en el momento en que ocurra el derrame y estas suposiciones son tan válidas como cualquier otra.

5.2.-) *SIMULACION CON EL PROGRAMA DE COMPUTADORA:*

Para demostrar el uso del programa de computadora, se escogió la estación de almacenamiento de gas de petróleo líquido ubicada en el Valle de San Juanico, Edo. de México, mostrada en la figura 5.1. Esta instalación contaba con 6 tanques esféricos y 48 tanques cilíndricos de diferentes capacidades, además de una llamarada a nivel de tierra para quemar exceso de gas y un estanque de agua para combate de incendios; el 19 de noviembre de 1984 ocurrió el peor accidente por causa del gas de petróleo líquido en la historia de México: Aproximadamente a las 5:30 A.M. empezó una fuga de gas en una unión bridada que formaba parte de la conexión de una tubería de ocho pulgadas que transportaba gas a un tanque esférico, al extenderse el área afectada por la fuga, el gas se encendió con la llama del quemador provocando una explosión de líquido en ebullición y vapor expandiente (BLEVE por sus siglas en inglés) en uno de los tanques esféricos al cual seguirían otros dos, además de varios de los recipientes cilíndricos que proyectaron segmentos de acero casi a un kilómetro de distancia, provocando daños personales y materiales incalculables.

Para los fines de la simulación se supondrá una fuga de etanol de 5 kg/s que se usa como solvente en las operaciones de mantenimiento en el taller (punto 1 de la figura 5.1), y una fuga de gas de 15 kg/s cerca de la alimentación de los tanques esféricos (punto 2 de la figura 5.1), y se considera que el gas está compuesto básicamente de n-butano. Las propiedades de cada sustancia son (Ref. 23):

a) Etanol:

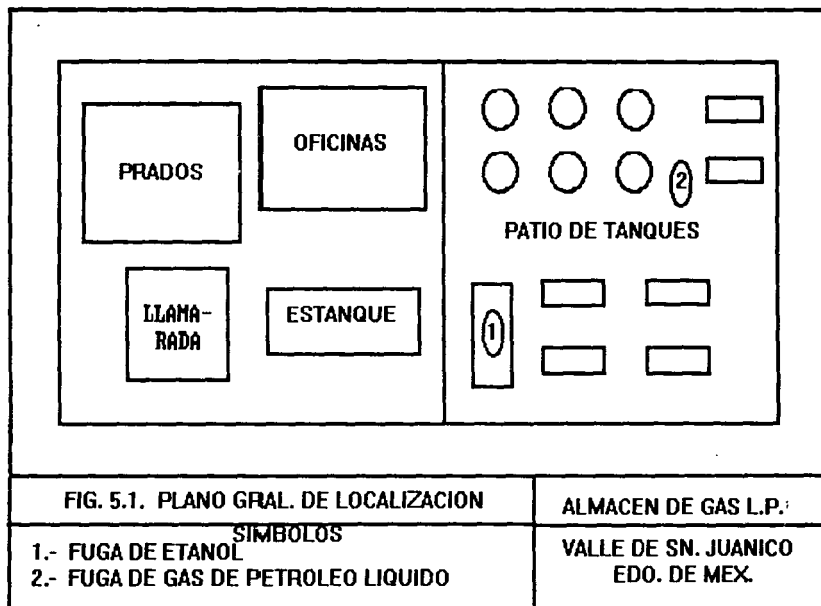
- Fórmula: C_2H_6O ,
- Masa molecular: 46.069 g/gmol,
- Temperatura crítica: 513.9 °K,
- Presión crítica: 61.4 bares,
- Volumen crítico: 167.1 cm^3 /gmol,
- Temperatura normal de ebullición: 351.4 °K,
- Factor acéntrico: 0.664,
- Temperatura de almacenamiento: 25 °C
- Presión de almacenamiento: 1 atmósfera.

b) Butano:

- Fórmula: C_4H_{10} ,
- Masa molecular: 58.124 g/gmol,
- Temperatura crítica: 425.2 °K,
- Presión crítica: 38 bares,
- Volumen crítico: 255 cm^3 /gmol,
- Temperatura normal de ebullición: 272.7 °K,
- Factor acéntrico: 0.199,
- Temperatura de almacenamiento: 25 °C
- Presión de almacenamiento: 17.6 atmósferas.

En la ref. 20 y 23 pueden encontrarse estas propiedades para varios compuestos, o en su defecto métodos para estimarse a partir de otros datos disponibles (principalmente en la ref. 23). Las presiones y temperaturas de almacenamiento fueron proporcionadas en comunicación privada por la Compañía Infra, S.A. de C.V. En el capítulo IV se explica a detalle el procedimiento para estimar cada propiedad del aire, del suelo, y de la sustancia derramada. Las condiciones consideradas en el derrame fueron:

- a) Velocidad del viento a nivel de piso: 2 m/s,
- b) Temperatura atmosférica: 25 °C,
- c) Presión atmosférica: 760 mm Hg,
- d) Gasto del derrame (en el caso del etanol): 5 kg/s
- e) Diámetro del derrame (para el butano): 2 m.



Los resultados con la simulación de etanol en estado estacionario indican que:

- a) El gasto vaporizado fué de 5 kg/s,
- b) El gasto vaporizado según el modelo de Sutton fué de 2.888446 kg/s,
- c) Diámetro del derrame: 35.04768 metros,
- d) Área del derrame: 964.7355 m²

En la figura 5.2 se ilustra la comparación entre la emisión calculada con el presente modelo y la obtenida con la ecuación de Sutton para el etanol una vez bloqueada la fuga (estado no estacionario), observando que este modelo tiende a sobreestimar la emisión. Los resultados con la fuga de butano arrojaron los siguientes resultados:

"En este caso, una parte se vaporiza instantáneamente, para luego formar un espejo que se evapora por el flujo de calor del suelo y la atmosfera por conducción". Y se obtuvieron los siguientes datos:

- a) Emisión entre 0 y 1 minuto: 1.8595 kg/s
(Vaporización instantánea),
- b) Emisión entre 1 minuto y 238094.3 minutos: $4.2947 \cdot 10^{-3}$ kg/s
(Vaporización por diferencias de temperatura),
- c) Gasto vaporizado según Sutton: $1.076974 \cdot 10^{-4}$ kg/s.

5.2.1.-) USO DEL PROGRAMA DE COMPUTADORA:

El paquete compilado corre tecleando E y luego la tecla "Enter" en el símbolo del sistema operativo en la unidad en la que se encuentre el programa, si no está compilado se busca con el editor de quickbasic un programa llamado E.BAS, se carga y se corre; al empezar a correr, pide la fórmula de la substancia para buscar sus propiedades en archivos de la unidad en la que está el programa; pregunta la fórmula y no el nombre por dos razones:

COMPARACION DE DATOS PARA ETANOL

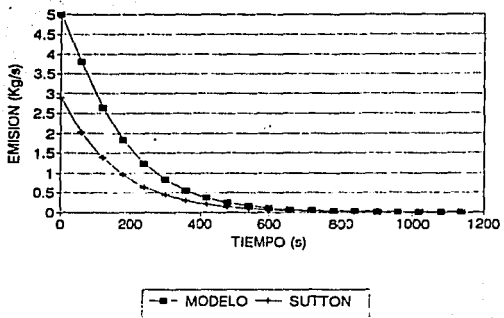


Fig. 5.2. Datos de la simulacion obtenidos para el etanol

COMPARACION DE DATOS PARA AGUA

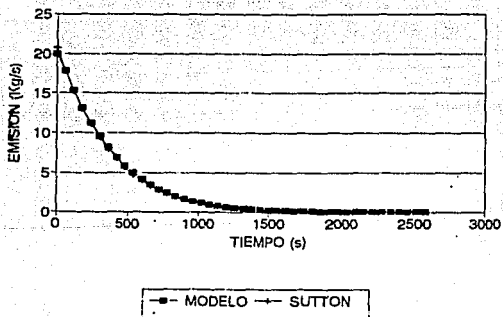


Fig. 5.3. Datos de la simulacion obtenidos para el agua

- a) Una misma fórmula puede tener varios nombres comerciales,
- b) El nombre de un archivo, por sintaxis del sistema operativo, no puede tener más de ocho caracteres más la extensión, por lo que es más eficiente escribir el nombre del archivo con la fórmula del compuesto, que con alguno de sus nombres que generalmente tienen más de ocho caracteres.

Si la substancia no se encuentra en archivos, el programa da la opción de volver a escribir el nombre si está equivocado o introducir los datos de una substancia nueva, automáticamente se graban a un archivo cuyo nombre es la fórmula con extensión "DAT". Si por el contrario la substancia se encuentra en archivos, o cuando ya se han grabado las propiedades de una nueva substancia, el programa toma los datos archivados y empieza la simulación:

Es importante mencionar que después de que se han introducido los datos, el programa pregunta si están bien, si no se vuelven a introducir; pero si se indica que son correctos se graban a un archivo, y la única manera de reescribirlos es borrando el archivo donde están, escribiendo (en el caso que se corra el programa de la unidad "B") :

B:\erase formula.dat

donde en "formula" se escribe la fórmula de la substancia.

Al iniciar la simulación, el programa pregunta las condiciones en las que se presentó la fuga (temperatura, presión atmosférica, velocidad del viento, gasto del derrame (primer caso) y diámetro del derrame (segundo caso)).

Una vez con todos los datos necesarios, el programa calcula la emisión dependiendo de si la substancia es líquida o gaseosa en condiciones normales y se pueden presentar dos casos:

5.2.1.1.-) LA SUBSTANCIA DERRAMADA ES LIQUIDA EN CONDICIONES NORMALES:

En este caso, el programa calcula la emisión y diámetro del derrame en estado estacionario y lo muestra en la pantalla; posteriormente al oprimir una tecla, se asume que el derrame se bloquea y se empiezan a calcular los diámetros y emisiones en función del tiempo; esto se muestra con un círculo que va disminuyendo su diámetro, conjuntamente se muestra la emisión y el tiempo transcurrido. Después de observar esta variación temporal, el programa presenta una gráfica donde se observan conjuntamente las emisiones calculadas con el modelo y con la ecuación de Sutton. En la figura 5.3 se puede observar que los resultados al simular con este modelo suponiendo que la substancia derramada es agua, son prácticamente idénticos a los obtenidos con la correlación empírica de Sutton, resultado lógico ya que esta ecuación fué desarrollada originalmente para predecir vaporización de océanos, en los demás casos este modelo arroja resultados de emisión ligeramente superiores a los predichos por la ecuación de Sutton como se observa en la figura 5.2.

5.2.1.2.-) LA SUBSTANCIA ES GASEOSA EN CONDICIONES NORMALES:

En este caso, el programa pregunta el diámetro del derrame, y muestra en la pantalla la emisión dependiendo del mecanismo de vaporización involucrado en los periodos de tiempo indicados. Es importante indicar que el usuario debe estimar la extensión del derrame porque no se conoce el mecanismo de transporte que conduce a la substancia a la atmósfera, y por lo tanto no puede estimarse una extensión de derrame.

5.3.-) CORRELACION DE SUTTON:

No hay datos disponibles de derrames lo suficientemente documentados para ser tomados como patrones de comparación en este trabajo, porque se requieren datos meteorológicos (perfil de velocidad del viento y humedad relativa con la altura y presión atmosférica), geológicos (perfiles de porosidad del suelo,

existencia de mantos freáticos, permeabilidad y composición con respecto a la profundidad), propiedades fisicoquímicas de la sustancia derramada y geometría del derrame. Así que se comparó el modelo con la correlación empírica de Sutton (ref. 29).

Las primeras investigaciones sobre el desarrollo de ecuaciones que permitieran pronosticar la vaporización de una sustancia en contacto con la atmósfera, se hicieron con agua de océanos, Jaeger (ref. 9) y Köhler (ref. 11) tratan a detalle este fenómeno y obtienen ecuaciones de la forma:

$$Q = (\text{constante}) (u_0)^{0.78} (L)^{0.89}$$

Posteriormente, a partir de los trabajos que efectuó Pasquill (ref. 19 Y 20) en un túnel de aire diseñado especialmente y usando una amplia variedad de líquidos, Thornthwait y Holzman publican en 1939 una ecuación que posteriormente generalizaría Holzman en 1943 (ref. 9) y que indica:

$$Q = \frac{\rho k_w^2 (q_1 - q_2) (u_2 - u_1)}{(\ln z_2/z_1)^2} \quad (5.1)$$

donde q_1 , q_2 y u_1 , u_2 son las humedades específicas y velocidades de viento medio a la altura z_1 y z_2 respectivamente, k es la constante de Kármán y ρ es la densidad del aire.

Es importante indicar que la ecuación 5.1 fué desarrollada considerando un perfil logarítmico de velocidad de viento, es decir, en condiciones adiabáticas (estabilidad atmosférica neutral).

Sutton (ref. 29) simplifica las ecuaciones anteriores a una sola altura, considerando que no hay vapor en la atmósfera y formula la correlación empírica:

$$Q = 0.00234 \rho v \frac{u_0^{0.78}}{(z_0 L)^{0.11}} \quad (5.2)$$

donde Q es la emisión a la atmósfera del líquido que se vaporiza con unidades de $\text{kg}/(\text{m}^2 \text{ seg})$, ρ_v es la densidad del vapor emitido, u_0 es la velocidad del viento a la altura z_0 y L es el diámetro del derrame.

La ecuación (5.2) ha probado una gran exactitud en el pronóstico de la emisión a la atmósfera en condiciones de turbulencia en túneles de viento, sin embargo la forma de la ecuación se desarrolló considerando:

- a) Una estabilidad atmosférica neutral,
- b) Que el suelo es impermeable, y
- c) Que el único mecanismo de vaporización presente es la convección forzada.

5.4.-) RESULTADOS DE LA COMPARACION CON LA CORRELACION DE SUTTON:

Para el primer caso, es decir cuando la substancia vaporizada es líquida a temperatura y presión atmosféricas, los datos obtenidos con la ecuación de Sutton y con el modelo son muy semejantes (fig. 5.2 y 5.3), siendo un poco menores los obtenidos con la ecuación de Sutton e idénticos para el caso de agua; pero cuando la substancia es gas a temperatura y presión atmosféricas, los resultados de emisión obtenidos con la ecuación de Sutton son muy diferentes, hecho comprensible si se considera que la ecuación de Sutton se basa en la suposición de que el único mecanismo de vaporización es el de convección forzada.

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

1.-) Se observó que la ecuación empírica de Sutton, originalmente desarrollada para evaporación de océanos proporciona prácticamente idénticos resultados que los obtenidos con el modelo cuando la substancia que se derrama es agua (con una desviación máxima del 3.4 %), lo que muestra que los fundamentos que dieron origen al modelo y que son totalmente independientes de las suposiciones y procedimientos que realizó Sutton son adecuados, y que su aplicabilidad es mayor que dicha ecuación. En el caso del etanol se obtuvieron resultados con una desviación máxima de 20 % a los obtenidos con la ecuación de Sutton, lo que muestra que la ecuación empírica de Sutton subestima la emisión. Es importante indicar que debido a las suposiciones teóricas en cuanto a las condiciones en las que se podría presentar el derrame, el modelo aquí presentado tiende a sobreestimar la emisión, hecho que debido a su objetivo de predecir el comportamiento de una substancia peligrosa en el ambiente para tomar medidas de emergencia, es mejor que subestimar la emisión.

2.-) Independientemente de los resultados obtenidos, en este trabajo se lograron plantear paso a paso los fundamentos fisicoquímicos y matemáticos que dan origen al modelo, así como las suposiciones y consideraciones hechas. También se explicaron detalladamente los métodos y procedimientos para estimar propiedades necesarias para la simulación del modelo, que no son fácilmente encontradas en tablas y que varían considerablemente con la presión y la temperatura.

3.-) Debido a que se desconocen las condiciones del suelo en el escenario de un accidente en el que se derrame una sustancia peligrosa, se hace la suposición de que el suelo es impermeable y seco, condiciones que son las peores posibles para contaminación atmosférica, ya que provocarán una emisión máxima al mantener el derrame en su máxima extensión. Esta suposición tiene mayor validez en contenedores fijos industriales porque los patios de tanques deben evitar la infiltración de posibles derrames al subsuelo. En la práctica, una vez que se conozcan las diferentes regiones por donde pasará un vehículo que transporte la sustancia peligrosa, o el lugar en que se encontrará permanentemente, pueden integrarse correcciones expresadas por factores explicados con detalle en el capítulo III.

4.-) Es importante indicar que en este trabajo se presentaron los métodos para obtener experimentalmente el número de Sherwood y de Nusselt a partir de correlaciones con otros grupos adimensionales; sin embargo en la práctica se obtienen buenos resultados si el número de Nusselt se calcula experimentalmente para transferencia de calor, y los coeficientes y exponentes empíricos se trasladan al cálculo del número de Sherwood para transferencia de masa.

5.-) Debido a que el programa de computadora empleado para implementar el modelo obtenido está desarrollado con técnicas de programación estructurada, se hace posible que cualquier módulo pueda ser cambiado sin necesidad de alterar a los demás. Esto permite contar con un programa de computadora que fácilmente pueda adaptarse al surgimiento de nuevas y mejores técnicas o procedimientos de cálculo.

6.-) El programa de computadora será mucho más útil si se cuenta con una base de datos extensa que contenga las propiedades de sustancias comúnmente empleadas y manejadas. Todas estas propiedades (o métodos para estimarlos) pueden encontrarse en la literatura, excepto la presión y temperatura del contenedor que deben tomarse de datos de operación reales, aunque el programa

contiene una base de datos con las sustancias más usuales: cloro, amoníaco, cloruro de hidrógeno, butano, acetona, benceno y tolueno. En el caso de mezclas de sustancias, se sugiere alimentar los datos del componente principal en el caso de no contar con los datos de la mezcla como tal.

7.-) Es conveniente acoplar posteriormente el presente modelo de emisión a otro de difusión que permita observar el comportamiento de la sustancia vaporizada en el atmósfera en función del tiempo y el espacio, proporcionando perfiles de concentración que permitan tomar medidas de emergencia adecuadas en áreas circundantes. Una vez acoplando ambos programas, será conveniente contar con una base de datos extensa acerca de las condiciones meteorológicas que puedan presentarse en los posibles escenarios de accidentes, esta base deberá contener: La rosa de los vientos, nubosidades e insolaciones que permitan estimar la estabilidad atmosférica; si no se tienen estos datos, se puede recurrir a una estación meteorológica cercana o a un aeropuerto para obtener los datos necesarios.

8.-) Es importante indicar que aunque existen otros programas en el mercado como *HOT SPILLS*, *DEGADIS*, *TRPUF* y otros, es difícil usarlos debido a que se desconocen los fundamentos teóricos que les dieron origen así como las suposiciones que se hicieron durante el desarrollo de las ecuaciones, a menos que se tome un curso como los que ofrece periódicamente la Air & Waste Mangement Association, de ahí la importancia de hacer un modelo que tenga sólidas bases teóricas y matemáticas de tal forma que el usuario comprenda lo que obtiene y obtenga el mayor provecho.

Como nota se puede agregar que el código del programa de computadora en el apéndice III, se encuentra con dos tipos de letra, porque el módulo principal está escrito con un tipo de letra y las funciones y subrutinas con un tipo de letra más pequeño.

SIMBOLOGIA.

SIMBOLO	NOMBRE	UNIDADES
a, b	Constantes de la ecuación virial	---
A	Area superficial del derrame	m ²
c	Capacidad calorifica a volumen constante	kcal/(kg K)
c _{agua}	Calor específico del agua	kcal/(kg K)
C	Contribución estructural	---
ε	Constante	---
C _A	Concentración de la sustancia derramada	kg/m ³
C _i	Concentración de la sustancia derramada en la película superficial	kg/m ³
C _o	Concentración inicial de la sustancia en la atmósfera	kg/m ³
d	Momento dipolar	debyes
D	Coefficiente de difusión	m ² /s
D _r	Factor de congelamiento	---
erf	Función error	---
erfc	función error complementaria	---
F _p	Factor de corrección por polaridad	---
F _R	Factor de corrección por polaridad	---
f _ω	Función del factor acéntrico	---
h	Espesor del derrame	m
h	Coefficiente de transferencia de calor	kcal/(m ² K s)
	Variable de la ecuación (4.21)	---
\bar{h}	coeficiente de transferencia de calor promedio	kcal/(m ² K s)
H	Variable de la ecuación (4.10)	---
ΔH _d	Entalpia de la sustancia derramada	kcal/kg

SÍMBOLO	NOMBRE	UNIDADES
ΔH_s	Calor latente de solidificación del agua	kcal/kg
ΔH_v	Calor latente de vaporización de la sustancia derramada	kcal/kg
ΔH_s	Entalpia de la sustancia almacenada	kcal/kg
J_A	Gasto másico vaporizado por unidad de área superficial del derrame	kg/(s m ²)
K	Constante de Boltzmann	J/K
k_a	Conductividad térmica del aire	kcal/(m K s)
k_N	Conductividad térmica del nitrógeno	kcal/(m K s)
k_o	Conductividad térmica del oxígeno	kcal/(m K s)
k_c	Coefficiente de transferencia de masa	m/s
\bar{k}_c	Coefficiente de transferencia de masa promedio	m/s
K	Variable de la ecuación (4.11)	---
K'	Constante modificada de D'arcy	m
L	Diámetro del derrame en la dirección en que sopla el viento	m
m	Masa	kg
M	Masa	kg
	Peso molecular	g/gmol
$m_e _{t_o}^t$	Masa total evaporada entre t_o y t	kg
m_o	Masa total de sustancia derramada	kg
m_v	Masa total de sustancia vaporizada	kg
n	Número de moles	gmol
p	Factor de percolación	---
P	Presión	N/m ²
P_c	Presión crítica	N/m ²
P_r	Presión reducida	---

SÍMBOLO	NOMBRE	UNIDADES
q	Flujo de calor	kcal/s
Q _d	Gasto másico del derrame	kg/s
Q _e	Gasto másico de entrada	kg/s
Q _s	Gasto másico de salida	kg/s
Q _v	Gasto másico de vaporización	kg/s
R	Constante del gas ideal	varía
t	Tiempo	s
T	Temperatura	K
T _b	Temperatura de ebullición normal de la sustancia derramada	K
T _c	Temperatura crítica	K
T _f	Temperatura de la película superficial del derrame	K
T _o	Temperatura atmosférica	K
T _r	Temperatura reducida	---
U	Energía interna	kcal
	Variable de la ecuación (4.8)	---
v	Velocidad del viento a nivel de piso	m/s
V	Volumen	m ³
w	Porciento de humedad en el suelo	---
V _b	Volumen molar del líquido	cm ³ /gmol
X [*]	Fracción másica de vapor	---
X _{t-r}	Distancia de transición entre flujo laminar y turbulento	m
y	Fracción molar en estado gaseoso	---
z	Eje zeta (altura)	m
Z	Factor de compresibilidad	---
Z _c	Factor de compresibilidad crítico	---
Nu	Número de Nusselt	---
\bar{Nu}	Número de Nusselt promedio	---
Pr	Número de Prandtl	---
Re	Número de Reynolds	---

SÍMBOLO	NOMBRE	UNIDADES
Sc	Número de Schmidt	---
Sh	Número de Sherwood	---
SH	Número de Sherwood promedio	---
α	Difusividad térmica	m ² /s
ϕ	Esfericidad promedio de los gránulos del suelo	---
c	Porosidad del suelo	---
	Energía característica de Lennard - Jones	kcal
ξ	Variable de la ecuación (4.6)	---
λ	Constante numérica	---
μ	Viscosidad dinámica del aire	kg/(m s)
η	Función adimensional	---
$\bar{\eta}$	Transformada de Fourier seno de la función η	---
ρ	Densidad absoluta del aire	kg/m ³
ρ_h	Densidad del suelo húmedo	kg/m ³
ρ_l	Densidad del líquido derramado	kg/m ³
ρ_s	Densidad absoluta del suelo	kg/m ³
ρ_v	Densidad del vapor saturado del líquido derramado	kg/m ³
σ	Longitud característica de Lennard - Jones	Å
γ	Tensión superficial	N/m
ω	Factor acéntrico	---
Ω_D	Integral de colisión	---

SUBÍNDICE	NOMBRE
ES	En estado sólido (congelado)
EL	En estado líquido
s	Del suelo
SH	Del suelo húmedo
SE	Del suelo seco
L	Del líquido derramado

REFERENCIAS.

- 1.-) Bird, R.B., Stewart, W.E. y Lightfoot E.N., Fenómenos de Transporte, Ediciones REPLA S.A., 2a Ed. (1987), pág. 9-12 a 9-30.
- 2.-) Bridgman, P.W., Dimensional Analysis, Yale University Press, New Haven. (1931), pág. 10 a 15.
- 3.-) Buckingham, E., Phys Rev., 4, 435 (1914).
- 4.-) Carslaw, H.S. and Jaeger, J.C., Conduction of Heat in Solids, Oxford University at the Clarendon Press, 2nd Ed. (1959), pág. 120 a 125.
- 5.-) Crank, J., Mathematics of Diffusion, Oxford University at the Clarendon Press., 2nd. Ed. (1957), pág. 90 a 100.
- 6.-) Fleisher, M.T., An Evaporation/Air Dispersion Model for Chemical Spills on Land, Shell Development Company., (1980), pág. 5 a 110.
- 7.-) Haaser, N.B., La Salle, J.P. y Sullivan J.A., Análisis Matemático, Editorial Trillas, 2a. Ed. (1990), pág. 760 a 763.
- 8.-) Holzman, B., Ann. N.Y. Acad. Sci., 44, 13 (1943).
- 9.-) Jaeger, J.G. Quart. Applied Math., 3, 210 (1945).
- 10.-) Kern, D.Q., Procesos de Transferencia de Calor, Cia. Editorial Continental. (1985), pág. 312 a 325.
- 11.-) Kóler H. Arkiv Geophys., 1, 8 (1930).
- 12.-) Ley General del Equilibrio Ecológico y la Protección al Ambiente, Ed. Porrúa, S. A. (1993), pág. 5
- 13.-) Luthe, R. Olivera, A. y Shutz, F., Métodos Numéricos, Editorial Limusa, 2a. Ed. (1980), pág. 170 a 173.
- 14.-) Lucas, K., "Phase Equilibria and Fluid Properties in the Chemical Industry", Dechema, Frankfurt. (1980), pág. 110 a 130
- 15.-) Mason, E.A., and Saxena, S.C., Phys. Fluids, 1:361 (1958).
- 16.-) Miller, J.W., Shah P.N. and Yaws C.L., Chem. Eng. 83 (25), 153 (1976).

- 17.-) Neufield, P.D., Janzen A.R. and Aziz R.A., J. Chem. Phys., 57:1100 (1972).
- 18.-) Pasquill, S., "Evaporation from a Plane, Free-Liquid Surface into a Turbulent Air Stream", Proc. Royal Soc., A182, 75, London (1943).
- 19.-) Pasquill, S., Proc. Roy. Soc. (London), A190, 232 (1947).
- 20.-) Perry, R.H. y Chilton, C.H., Manual del Ingeniero Químico, Mc. Graw Hill, 2a. Ed. (1982), pág. 3-1 a 3-310
- 21.-) Priestley, C.H.B., Turbulent Transfer in The Lower Atmosphere, The University of Chicago Press. (1959), pág. 89 a 96.
- 22.-) Reichenberg, D., "New Simplified Methods for the Estimation of the Viscosities of Gas Mixtures at Moderate Pressure", Natl. Eng. Lab. Rept. Chem. 53, East Kilbride, Glasgow, Scotland, May 1977.
- 23.-) Reid, R.C., Prausnitz J.M. and Poling B.E., The Properties of Gases and Liquids, Mc. Graw Hill Co., 4th Ed. (1988), pág. 95 a 150, 205 a 240, 388 a 631.
- 24.-) Rohsenow, W.M. and Choi H.Y., Heat, Mass and Momentum Transfer, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J. (1961), pág. 117 a 121.
- 25.-) Schlichting, H., Boundary Layer Theory, Mc. Graw Hill Co., 6th Ed., (1968), pág. 51 a 60.
- 26.-) Sherwood, T.K., Pigford, R.L. and Wilke, C.R., Mass Transfer, Mc. Graw Hill Co. (1975), pág. 115 a 119.
- 27.-) Smith, J.M. y Van Ness, H.C., Introducción a La Termodinámica en Ingeniería Química, Mc. Graw Hill, (1980), pág. 95 a 97.
- 28.-) Spiegel, M.R., Manual de Fórmulas y Tablas Matemáticas, Mc. Graw Hill. (1970), pág. 174 a 178.
- 29.-) Sutton, O.G., Micrometeorology, Mc. Graw Hill Co. (1953), pág. 272 a 323.
- 30.-) Tranter, C.J., Transformadas Integrales en La Física Matemática, U.T.E.H.A. (1964), pág. 95 a 98.
- 31.-) Treybal, R.E., Operaciones de Transferencia de Masa, Mc Graw Hill, 2a. Ed. (1988), pág. 79 a 82.
- 32.-) Turcotte, D. S. G., Geodynamics. Applications of Continuum Physics to Geological Problems, New York: Wiley. (1982), pág. 168 a 174.

- 33.-) Vetere, A., "New Generalized Correlations for Enthalpy of Vaporization of Pure Compounds", Laboratori Ricerche Chimica Industriale, SNAM PROGETT, San Donato Milanese. (1973), pág. 83 a 120.
- 34.-) Wilke, C.R., and Lee C.Y., Ind. Eng. Chem., 47:1253 (1955)

APENDICE I.

BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA.

I.1.-) BALANCE DE MATERIA:

En un sistema abierto, el balance de materia en su frontera es:

$$\text{Entradas} + \text{Producción} = \text{Salidas} + \text{Acumulación} + \text{Remoción}$$

La producción y remoción se suele expresar en un solo término T como fuentes y sumideros de la sustancia sobre la que se esté realizando el balance.

Si no hay reacciones químicas que consuman ni generen sustancias, es decir, si no hay fuentes ni sumideros, se dice que la sustancia es conservativa y el balance general de materia es:

$$\text{Entradas} = \text{Salidas} + \text{Acumulación}$$

Por lo tanto la acumulación o la variación neta de materia respecto al tiempo es lo que entra menos lo que sale; expresado en forma de variaciones instantáneas (derivadas), el balance adquiere la forma:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \dot{M}_e - \dot{M}_s = Q_e - Q_s$$

donde M es la representación de Newton para la variación instantánea de la masa (M) respecto al tiempo, que es el gasto másico (Q).

Si se aplica este balance a un sistema en que una substancia sale de un contenedor con un gasto másico Q_d , y se vaporiza con un gasto Q_v , se obtiene:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = Q_d - Q_v$$

que es la ecuación (2.1) con la que se inicia el desarrollo del capítulo II.

I.2.-) *BALANCE DE ENERGIA.*

En contraste con el balance de materia, el balance de energía para un sistema abierto no estacionario es:

velocidad de acumulación de energía cinética e interna	=	velocidad de en- trada de energía cinética e interna por convección	-	velocidad de salida de energía cinética e interna por con- vección
		+ velocidad neta de adición de calor por conducción	-	velocidad neta de trabajo comunicado por el sistema a los alrededores.

Si se considera un caso particular de transferencia de calor por conducción en un medio sólido, en que se cumplan las siguientes condiciones:

- a) No hay transporte de calor por convección,
- b) No hay trabajo realizado por el sistema a los alrededores.
- c) No hay un flujo de materia en el medio sólido de conducción.

El balance de energía queda:

velocidad de acumulación de energía interna = velocidad neta de adición de calor por conducción

La energía interna corresponde a la energía relacionada con los movimientos fortuitos de traslación e internos de las moléculas, más la energía de interacción entre las moléculas; es decir, que la energía interna depende de la temperatura local y de la densidad del medio de conducción. Expresando lo anteriormente explicado como ecuaciones se tiene:

$$\rho \cdot \frac{dU}{dt} = - \nabla \cdot q \quad (I.1)$$

donde U es la energía interna del medio de conducción, ρ la densidad del suelo, q el flujo de calor por conducción (el operador nabla es para generalizar a un estado tridimensional la variación del flujo de calor respecto al tiempo) y t el tiempo. Si se considera que el flujo solo es en una sola dirección (eje z), la ecuación (I.1) toma la forma:

$$\rho \cdot \frac{dU}{dt} = - \frac{dq}{dz} \quad (I.2)$$

Es conveniente expresar a la energía interna como una función de variables medibles como el volumen y la temperatura, por lo que por definición:

$$dU = \left(\frac{dU}{dV} \right)_{T_{cte}} dV + \left(\frac{dU}{dT} \right)_{V_{cte}} dT \quad (I.3)$$

Si el medio no sufre cambios notables de volumen, el primer sumando del miembro derecho de la ecuación (I.2) se vuelve cero y se tiene:

$$dU = \left(\frac{dU}{dT} \right)_{\text{vcte}} dT = c dT \quad (\text{I.4})$$

donde c es la capacidad calorífica a volumen constante del medio. Substituyendo la ecuación (I.4) en la ecuación (I.2) se obtiene:

$$\rho_s c \frac{dT}{dt} = - \frac{dq}{dz} \quad (\text{I.5})$$

Por otro lado, la Ley de Fourier (ref. 1) establece que: $q = -k \partial T / \partial z$, donde k es una constante de proporcionalidad conocida como *conductividad térmica*. Substituyendo la Ley de Fourier en la ecuación (I.5) se obtiene:

$$\rho_s c \frac{dT}{dt} = k \frac{d^2 T}{dz^2} \quad (\text{I.6})$$

A modo de simplificación se puede introducir una variable α conocida como *difusividad térmica* y que se define como:

$$\alpha = \frac{k}{\rho_s c} \quad (\text{I.7})$$

substituyendo la ecuación (I.7) en la (I.6) se obtiene:

$$\frac{dT}{dt} = \alpha \frac{d^2 T}{dz^2}$$

que es la ecuación (3.7) de conducción de calor en un medio sólido.

APENDICE II.

SOLUCION ANALITICA DE LA ECUACION (3.7).

La ecuación diferencial parcial:

$$\frac{\partial^2 T(z,t)}{\partial z^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T(z,t)}{\partial t} \quad (3.7)$$

con las condiciones a la frontera:

$$T(\infty, t) = T_0 \quad (3.7a)$$

$$T(0, t) = T_B \quad (3.7b)$$

$$T(z, 0) = T_0 \quad (3.7c)$$

La ecuación (3.7) puede resolverse de varias formas, pero se consideró para este trabajo que el método más adecuado es el que emplea una transformada de Fourier seno para eliminar la doble derivada espacial y convertir la ecuación (3.7) en una ecuación diferencial sencilla; sin embargo para que la solución sea general se define una variable adimensional η :

$$\eta = \frac{T - T_0}{T_B - T_0} \quad (II.1)$$

Considerando esta nueva variable, la ecuación diferencial (3.7) se convierte en:

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial \eta}{\partial t} \quad (II.2)$$

Y las condiciones a la frontera (3.7a), (3.7b) y (3.7c) se convierten en:

$$\eta(\infty, t) = 0 \quad (\text{II.2a})$$

$$\eta(0, t) = 1 \quad (\text{II.2b})$$

$$\eta(z, 0) = 0 \quad (\text{II.2c})$$

Antes de iniciar la resolución formal de la ecuación (II.2), es conveniente definir la transformada de Fourier seno como:

$$\bar{\eta} = \int_0^{\infty} \eta \operatorname{sen} pz \, dz \quad (\text{II.3})$$

donde $\bar{\eta}$ es la transformada de Fourier seno de la función η .

Para reducir el término espacial de la ecuación diferencial, se multiplica éste por $\operatorname{sen} pz$ (núcleo de la transformada) y se integra con respecto a z desde 0 hasta ∞ . Integrando por partes, se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \bar{\eta}}{\partial z^2} &= \int_0^{\infty} \operatorname{sen} pz (\partial^2 \eta / \partial z^2) \, dz = \left[(\partial \eta / \partial z) \operatorname{sen} pz \right]_{z=0}^{\infty} \\ &\quad - p \int_0^{\infty} \cos pz (\partial \eta / \partial z) \, dz \end{aligned} \quad (\text{II.4})$$

El primer término del último miembro de la ecuación (II.4), se anula en su límite inferior debido a que el $\operatorname{sen} 0 = 0$; se anula también en su límite superior, porque como se observa en la condición a la frontera (II.2a), $\partial \eta / \partial z = 0$ cuando $z = \infty$ es cero. Por lo tanto integrando el segundo término del último miembro de la ecuación (II.4) se obtiene:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \operatorname{sen} pz (\partial^2 \eta / \partial z^2) \, dz &= -p \int_0^{\infty} \cos pz (\partial \eta / \partial z) \, dz = -p \left[\eta \cos pz \right]_{z=0}^{\infty} \\ &\quad - p^2 \int_0^{\infty} \eta \operatorname{sen} pz \, dz \end{aligned} \quad (\text{II.5})$$

De la condición a la frontera (II.2a), se concluye que $\eta = 0$ cuando $z = \infty$, y sustituyendo la última integral por la definición de la transformada seno de Fourier dada en la ecuación (II.3), la ecuación (II.5) queda:

$$\int_0^{\infty} \text{sen } pz (\partial^2 \eta / \partial z^2) dz = -p [\eta]_{z=0} - p^2 \bar{\eta} \quad (\text{II.6})$$

Transformando toda la ecuación diferencial (II.2), asumiendo que $[\eta]_{z=0} = 1$ por la condición a la frontera (II.2b) y sustituyendo la ecuación (II.6) en la ecuación:

$$\alpha \frac{\partial^2 \bar{\eta}}{\partial z^2} = \frac{\partial \bar{\eta}}{\partial t}$$

se obtiene:

$$\frac{\partial \bar{\eta}}{\partial t} = \alpha (-p(1) - p^2 \bar{\eta}), \quad \text{si } t > 0 \quad (\text{II.7})$$

$$\text{y } \bar{\eta} = 0, \quad \text{cuando } t = 0 \quad (\text{II.7a})$$

Reacomodando la ecuación (II.7a) de la forma:

$$y'(x) + p(x)y(x) = q(x)$$

se tiene:

$$\frac{\partial \bar{\eta}}{\partial t} + \alpha p^2 \bar{\eta} = -\alpha p \quad (\text{II.8})$$

Esta ecuación se resuelve obteniendo un factor integrante de la forma:

$$f = e^{\int p(x) dx}$$

donde $p(x) = \alpha p^2$. Multiplicando el factor integrante por la ecuación (II.8) e integrando se tiene:

$$\bar{\eta} = \frac{1}{p} + \mathcal{C} e^{-\alpha p^2 t} \quad (\text{II.9})$$

donde \mathcal{C} es una constante de integración. La solución obtenida (II.9) que satisface la condición (II.7a) es:

$$\bar{\eta} = (1/p) [1 - e^{-\alpha p^2 t}] \quad (\text{II.10})$$

Lo que se obtuvo es la solución de la función transformada $\bar{\eta}$; ahora se requiere invertirla a la función original η , para ello se emplea la fórmula de inversión:

$$\eta = (2/\pi) \int_0^{\infty} \bar{\eta} \operatorname{sen} pz \, dp \quad (\text{II.11})$$

Sustituyendo la ecuación (II.8) en la (II.9), se obtiene:

$$\eta = (2/\pi) \int_0^{\infty} [1 - e^{-\alpha p^2 t}] \operatorname{sen} pz \, (dp/p) \quad (\text{II.12})$$

Debido a que (ref. 28):

$$\int_0^{\infty} \operatorname{sen} pz \, (dp/p) = \pi/2$$

la ecuación (II.12) puede escribirse como:

$$\eta = 1 - (2/\pi) \int_0^{\infty} e^{-\alpha p^2 t} \operatorname{sen} pz \, (dp/p) \quad (\text{II.13})$$

Y si se define la función error (fer) de la función $f(x)$ como:

$$\operatorname{fer}(f(x)) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{f(x)} e^{-u^2} \, du$$

entonces la ecuación (II.13) puede escribirse como:

$$\eta = 1 - \operatorname{fer} \left(\frac{z}{2 \sqrt{\alpha} t} \right) = \operatorname{ferc} \left(\frac{z}{2 \sqrt{\alpha} t} \right) \quad (\text{II.14})$$

donde $\operatorname{ferc}(x)$ es la función error complementaria de (x) , y se define como $1 - \operatorname{fer}(x)$. Sustituyendo la definición de la función η de la ecuación (II.1) en la ecuación (II.14), se tiene:

$$\eta = \frac{T - T_0}{T_B - T_0} = \operatorname{ferc} \left(\frac{z}{2 \sqrt{\alpha} t} \right) \quad (\text{II.15})$$

Por último, para poner la ecuación (II.15) en términos de la función error, se despeja T:

$$T = (T_B - T_0) \operatorname{ferc} \xi + T_0 \quad (\text{II.16})$$

donde $\xi = z/\sqrt{4\alpha t}$. Desarrollando la ecuación (II.16) se obtiene:

$$T = (T_B - T_0) (1 - \operatorname{fer} \xi) + T_0 = T_B - T_0 - T_B \operatorname{fer} \xi + T_0 \operatorname{fer} \xi + T_0 \quad (\text{II.17})$$

Simplificando términos en la ecuación (II.17) y factorizando $\operatorname{fer} \xi$, se obtiene:

$$T = \operatorname{fer} \xi (T_0 - T_B) + T_B \quad (\text{II.18})$$

Dejando en el miembro derecho únicamente $\operatorname{fer} \xi$, y sustituyendo la definición de ξ , se tiene:

$$\frac{T - T_B}{T_0 - T_B} = \operatorname{fer} \left(\frac{z}{2 \sqrt{\alpha} t} \right) \quad (\text{II.19})$$

Que es la solución analítica de la ecuación diferencial (3.7)

APENDICE III.

CODIGO DEL PROGRAMA.

```
DECLARE SUB CENTRAP (TEXTOS, R1)
DECLARE SUB GRAFICA (X10, Y10, X11, X21, Y11, Y21, C1, I1)
DECLARE SUB DETENTE (TS1)
DECLARE SUB GRAFICATOT (X10, Y110, Y210, X11, X21, Y11, Y21, C11, C21, N1, NOMS)
DECLARE FUNCTION ME1 (T1, TP, L, TA, TB, TC, PC, M)
DECLARE SUB GRAFDATOS (L10, Q10, QVS0, T0, N1, X11, X21, Y11, Y21)
DECLARE FUNCTION ZETA1 (TA1, TC1, PA1, PCI, W1)
DECLARE FUNCTION ENTVAPI (TC1, TBI, PCI)
DECLARE FUNCTION ENTALPIA1 (M, PI, TA1, W1, PCI, TCI)
DECLARE FUNCTION COEFDIFI (MI, TBI, TA1, PA1, VC)
DECLARE FUNCTION DENVAPI (PI, MI, TPI, TCI, PCI, W)
DECLARE FUNCTION DENLIQ1 (VC, M)
DECLARE FUNCTION CONDTERELEMI (TA1, AI, BI, CI, DI)
DECLARE FUNCTION CONDTERAIRE1 (TA1)
DECLARE FUNCTION CEAT1 (TA1)
DECLARE FUNCTION DENAIRE1 (PA1, TA1)
DECLARE FUNCTION VISAIRE1 (TA)
DECLARE FUNCTION VISELEMI (TA1, PCI, TCI, ZCI, MI, DI)
DECLARE SUB FIN ()
DECLARE SUB CENTRA (TEXTOS, R1)
DECLARE SUB SUBSTANCIA (NOMBRES)
DECLARE SUB ALARMA ()
DECLARE SUB MENSAJE (TEXTOS, T5)
DECLARE SUB FALLAS (BANDERA1, NOMBRES)
DECLARE FUNCTION MAX1 (A10, N1)
DECLARE FUNCTION MINI (A10, N1)
DECLARE SUB TAMANO (TEXTOS, X11, X21)
DECLARE SUB BORRA (X11, Y11, X21, Y21)
DECLARE SUB CUADRO (X11, Y11, X21, Y21, C1)
DECLARE SUB CASO1 (TA, PA, M, TC, PC, VC, W, TB, V, R, NOMS)
DECLARE SUB CASO2 (TA, PA, M, TC, PC, VC, W, TB, TCON, PCON, V, R, NOMS)
```

' DEFINICION DE ARREGLOS:

```
DIM SHARED PI
PI = 3.141592
DIM SHARED L(0 TO 1000), QV(0 TO 1000), QVS(0 TO 1000), T(0 TO 1000)
```

.....
 ' DATOS DISPONIBLES EN EL ACCIDENTE

DO

```

R = 0
ON ERROR GOTO FF
INICIO:
  BANDERA = 0
  CLS
  COLOR 12
  LOCATE 6, 7
  INPUT "¿CUAL ES LA FORMULA DE LA SUBSTANCIA DERRAMADA? ", NOMS
  NS = LEFTS(NOMS, 8)
  OPEN NS + ".dat" FOR INPUT AS #1
  INPUT #1, NOMBRES, M, TC, PC, VC, W, TB, TCON, PCON
  CLOSE #1
  LOCATE 8, 7
  PRINT "EL NOMBRE DE LA SUBSTANCIA ES: ";
  COLOR 10
  PRINT NOMBRES
  COLOR 12
  LOCATE 10, 7
  INPUT "VELOCIDAD DEL VIENTO A NIVEL DEL PISO EN METROS/SEGUNDO = ", V
  LOCATE 12, 7
  INPUT "TEMPERATURA ATMOSFERICA EN GRADOS CENTIGRADOS = ", TA
  LOCATE 14, 7
  PRINT "PRESION ATMOSFERICA EN MILIMETROS DE MERCURIO "
  LOCATE 15, 7
  INPUT "(PRESIONE CERO SI NO LO SABE) = ", PA
  IF PA = 0 THEN
    LOCATE 17, 7
    PRINT "ALTURA EN METROS SOBRE EL NIVEL DEL MAR "
    LOCATE 18, 7
    INPUT "(PRESIONE CERO SI NO LO SABE) = ", ALT
    R = 18
    PA = 760 - .079090909# * ALT
  ELSE
    R = 15
  END IF

```

.....
 ' IDENTIFICACION DEL CASO EN QUE SE ENCUENTRA LA SUBSTANCIA


```

T = TA + 273.15
IF TB >= T THEN
  CASO1 TA, PA, M, TC, PC, VC, W, TB, V, R, NOMBRES
ELSE
  CASO2 TA, PA, M, TC, PC, VC, W, TB, TCON, PCON, V, R, NOMBRES
END IF
LOOP
FF:
  FALLAS BANDERA, NOMS
  RESUME INICIO
END

```

FALLA DE ORIGEN

 SUB ALARMA

* ESTA SUBROUTINA PRODUCE UN SONIDO BREVE

SOUND 1875, 6
 SOUND 701, 9
 END SUB

SUB BORRA (X1, Y1, X2, Y2)

* ESTA SUBROUTINA BORRA UN RECTANGULO ACOTADO POR XL(X1,Y1) Y X2

msg = STRING\$(X2 - X1 + 1, 32)
 FOR J = Y1 TO Y2
 LOCATE J, X1 - 1
 PRINT msg
 NEXT J
 END SUB

SUB CASO1 (TA, PA, M, TC, PC, VC, W, TL, V, R, NOME)

* ESTA SUBROUTINA CALCULA LA EMISION DEL PRIMER CASO

COLOR 12
 LOCATE 8, 2, 7
 INPUT "GASTO DEL DERRAME EN KILOGRAMOS/SEGUNDO = ", GD
 MESSAGE "LOS DATOS SON CORRECTOS (S/N)", DS
 DS = UCASE\$(DS)
 IF DS = "S" AND DS = "N" THEN
 ALARMA
 MESSAGE "PRESIONE S O N", IS
 ELSEIF DS = "N" THEN
 EXIT SUB
 END IF

* ESTADO ESTACIONARIO

VEL = V * 10 ^ J
 VIS = (VISAJRECTA) * 0.000001
 DEN = DENVAJ(PA, TA)
 DAB = (COEFDIRM, TL, TA, PA, VC) / 100 * J
 TP = (TA + 273.15 + TB) / 2
 DENV = DENVAJ(PA, M, TP, TC, PC, W)
 DENL = DENLIQ(VC, M)
 SC = VIS / (DAB * DEN)
 L = 300
 H = 0.001
 DO
 FX = (237 * SC ^ (1/3)) * ((DEN * V / VIS) ^ 8 * L ^ 11 * 15200 * L) * PI / 4 * DAB * DENV - GD
 DFPA = (237 * SC ^ (1/3)) * ((DEN * V / VIS) ^ 8 * L ^ 10 * 11 * 15200 * (L + 10)) * PI / 4 * DAB * DENV - GD
 DFR = (DFPA - FX) / H
 LI = L - (FX / DFR)
 L = LI - (FX / DFR)
 LOOP UNTIL ABS(L - LI) < 0.0001
 RE = (DEN * V ^ 1) / VIS
 AREA = (PI * Q) * L ^ 2
 IF RE > 10000 THEN
 CLS
 COLOR 10
 CEN1RA "RESULTADOS EN ESTADO ESTACIONARIO", 3
 COLOR 12
 LOCATE 1, 15
 PRINT "GASTO VAPORIZADO = ", GD, " kg/s"
 Q = (0.0234 * DEN * VEL ^ 76) / ((10 * L) ^ 11)
 LOCATE 7, 15
 PRINT "GASTO VAPORIZADO SEGUN SUTTON = ", Q * AREA, "kg/s"
 LOCATE 8, 15
 PRINT "DIAMETRO DEL DERRAME = ", L, " m"
 LOCATE 11, 15
 PRINT "AREA DEL DERRAME = ", AREA, " m^2"
 ELSE
 L = GD / (64 * SC ^ (1/3)) * ((V / VIS) ^ (1/3)) * (PI / 4) * DAB * DENV ^ 0 / 10
 CLS
 COLOR 10
 CEN1RA "RESULTADOS EN ESTADO ESTACIONARIO", 3
 COLOR 12
 LOCATE 1, 15
 PRINT "GASTO VAPORIZADO = ", GD, " kg/s"
 Q = (0.0234 * DEN * VEL ^ 76) / ((10 * L) ^ 11)
 LOCATE 7, 15
 PRINT "GASTO VAPORIZADO SEGUN SUTTON = ", Q * AREA, "kg/s"
 LOCATE 8, 15
 PRINT "DIAMETRO DEL DERRAME = ", L, " m"
 LOCATE 11, 15
 PRINT "AREA DEL DERRAME = ", AREA, " m^2"
 END IF
 LI = L

FALLA DE ORIGEN

* ESTADO NO ESTACIONARIO

```

COLOR 10
CENTRA PRESIONE CUALQUIER TECLA PARA INDICAR QUE EL DERRAME: 14
CENTRA "HA SIDO BLOQUEADO, O PRESIONE LA TECLA T PARA": 16
CENTRA "ALLIENTAR UN TIEMPO Y OBTENER LA EMISION, EL DIAMETRO, Y
CENTRA "V AREA SUPERFICIAL DEL DERRAME": 20
R3 = D(PI*TI)
R3 = UCASE(R3)
CA = (317 * SC ** (1 / 3)) * DAB * DENV / (100 * DENL)
CAA = (DEN * V / VIS) * 2
DY = (CA * (DEN * V / VIS) * 8 * L * 18 - 15200 * L) / L
IF R3 = "T" THEN
DO
PREGUNTA:
CLS
COLOR 10
LOCATE 7, 7
INPUT "A QUE TIEMPO EN MINUTOS DESEA EL GASTO Y EL DIAMETRO?, TIEMPO
TF = TIEMPO * 60
IF R3 > 30000 THEN
H = -10
L = LI
T = 0
DO
K1 = (CA * (CAA * L * 18 - 15200 * L)) / L
K2 = (CA * CAA * L * (01 * K1 / 2)) * 18 - 15200 * L + (01 * K1 / 2)) / L + (01 * K1 / 2)
K3 = (CA * CAA * L * (01 * K2 / 2)) * 18 - 15200 * L + (01 * K2 / 2)) / L + (01 * K2 / 2)
K4 = (CA * CAA * L * (01 * K3)) * 18 - 15200 * L + (01 * K3)) / L + (01 * K3)
L1 = L * ((01 * (1 / 0)) * (K1 + 2 * K2 + 3 * K3 + K4))
T = T - H
IF L <= 0 THEN
MENSAJE "EL DERRAME SE EVAPORO ANTES", 91
COTO PREGUNTA
GOTO PREGUNTA
END IF
L = LI
LOOP UNTIL ABS(TF - T) < 1
QV = 317 * SC ** (1 / 3) * (DENV * V / VIS) * 8 * L * 18 - 15200 * L * PI / 4 * DAB * DENV
AREA = PI * L * L * 2
IF QV <= 0 THEN
LOCATE 10, 7
PRINT "EL GASTO VAPORIZADO NO ES CUANTIFICABLE"
ELSE
LOCATE 10, 7
PRINT "EL GASTO VAPORIZADO = ", QV, "kg/s"
END IF
Q = (.9234 * DEN * VEL * 70) / ((10 * L) * 31)
LOCATE 12, 7
PRINT "GASTO VAPORIZADO SEGUN SUTTON = ", Q * AREA, "kg/s"
LOCATE 14, 7
PRINT "DIAMETRO DEL DERRAME = ", L, " m"
LOCATE 16, 7
PRINT "AREA DEL DERRAME = ", AREA, " m^2"
LOCATE 22, 2
PRINT "presione cualquier tecla para continuar"
CB = D(PI*TI)
ELSE
AREA = PI * L * L * 2
CB = (664 * SC ** (1 / 3) * (V / VIS) * (1 / 3)) * DAB * DENV * (3 / 2) / (DEN * 1000)
L = (02 * L1 * (1 / 2) - CB * 7) / 2 * 2
QV = (664 * SC ** (1 / 3) * (V / VIS) * (1 / 3)) * PI / 4 * L * (3 / 2) * DENV * (3 / 2)
IF QV <= 0 THEN
LOCATE 10, 7
PRINT "EL GASTO VAPORIZADO NO ES CUANTIFICABLE"
ELSE
LOCATE 10, 7
PRINT "EL GASTO VAPORIZADO = ", QV, "kg/s"
END IF
Q = (.9234 * DEN * VEL * 70) / ((10 * L) * 31)
LOCATE 12, 7
PRINT "GASTO VAPORIZADO SEGUN SUTTON = ", Q * AREA, "kg/s"
LOCATE 14, 7
PRINT "DIAMETRO DEL DERRAME = ", L, " m"
LOCATE 16, 7
PRINT "AREA DEL DERRAME = ", AREA, " m^2"
LOCATE 22, 2
PRINT "presione cualquier tecla para continuar"
CB = D(PI*TI)
END IF
LOCATE 22, 1
PRINT STRING$(R, 9)
LOCATE 12, 15
PRINT STRING$(L, 9)
MENSAJE "DESEA OBTENER INFORMACION A OTRO TIEMPO? (S/N): RES
R33 = UCASE(R33)
IF RES <= "S" AND RES <= "N" THEN
MENSAJE "PRESIONE S O N", 91
END IF
LOOP UNTIL RES = "N"
DO
MENSAJE "DESEA OBSERVAR LA VARIACION TEMPORAL DEL DERRAME? (S/N), AV1
R35 = UCASE(R35)
IF R35 = "N" THEN

```

FALLA DE ORIGEN

```

FIN
EXIT SUB
ELSEIF R VS = "F" THEN
EXIT DO
ELSE
MENSAJE "PRESIONE 'O' O 'N', SI
END IF
LOOP
END IF
IF AE > 330000 THEN
H = 60 * -1
L = L1
T = 0
I = 1
L0 = L1
QV(0) = QD
QV(9) = ( 0.0234 * DEN * VEL ^ .70) / ((10 * L0) ^ .11) * AREA
DO
K1 = (CA * (CAA * L * 1.8 - 13200 * L1)) / L
K2 = (CA * (CAA * (L * (1 * K1 / 2)) * 1.8 - 13200 * (L * (1 * K2 / 2)))) / (L * (1 * K1 / 2))
K3 = (CA * (CAA * (L * (1 * K2 / 2)) * 1.8 - 13200 * (L * (1 * K3 / 2)))) / (L * (1 * K2 / 2))
K4 = (CA * (CAA * (L * (1 * K3)) * 1.8 - 13200 * (L * (1 * K4)))) / (L * (1 * K3))
L1 = L * (1 * (1 / 6) * (K1 + 2 * K2 + 2 * K3 + K4))
T = T + H
L = L1
AREA = PI / 4 * L ^ 2
L0 = L
QV = PI / 4 * DEN * 0.06 * L0 * ((L0) - L1) / (T * (T + 10))
QV(9) = QV
QV(0) = ( 0.0234 * DEN * VEL ^ .70) / ((10 * L1) ^ .11) * AREA
T0 = T
I = I + 1
LOOP UNTIL ABS(L1 - L) - L1 >= .1
GRAFICAT0 L0, QV0, QV9, T0, L, 30, 400, 30, 400
SCREEN 0
GRAFICAT0 T0, QV0, QV9, 100, 300, 100, 390, 14, 12, L, NOMS
C0 = INPUT$(1)
SCREEN 0
GRAFICA T0, L0, 100, 300, 100, 390, 3, 1
C0 = INPUT$(1)
SCREEN 0
FIN
EXIT SUB
ELSE
CD = ( 644 * SC * (1 / 3) * (V / V15) ^ (1 / 3) * DAB * DEN * (D / 2)) / (100 * DEN)
L0 = L1
QV(0) = QD
QV(9) = ( 0.0234 * DEN * VEL ^ .70) / ((10 * L0) ^ .11) * AREA
I = 0
DO
I = I + 1
L0 = (L * L1 * (1 / 2) - CD * T) / 2
QV(0) = (644 * SC * (1 / 3) * (V / V15) ^ (1 / 3) * PI / 4 * L * (D / 2) * DEN * (D / 2))
AREA = PI / 4 * L0 ^ 2
QV(9) = ( 0.0234 * DEN * VEL ^ .70) / ((10 * L1) ^ .11) * AREA
T0 = T
LOOP UNTIL L <= 0
CLS
GRAFICAT0 L0, QV0, QV9, T0, L, 30, 400, 30, 400
SCREEN 0
GRAFICAT0 T0, QV0, QV9, 100, 300, 100, 390, 14, 12, L, NOMS
C0 = INPUT$(1)
SCREEN 0
GRAFICA T0, L0, 100, 300, 100, 390, 3, 1
C0 = INPUT$(1)
SCREEN 0
FIN
EXIT SUB
END IF
END SUB

```

```

SUB CASO2 (TA, PA, M, TC, PC, VC, W, TR, TCON, PCOM, V, R, NOMS)
*****
* ESTA SUBRUTINA CALCULA LA EMISION DEL SEGUNDO CASO
*****

```

```

COLOR 12
LOCATE 8 + 2, 7
INPUT "DIAMETRO DEL DEBARRAM EN METROS = ", L
MENSAJE "LOS DATOS SON CORRECTOS (S/N), DE
DS = UCASE$(DS)
IF DS <= "N" AND DS <= "Y" THEN
ALARMA
MENSAJE "PRESIONE 'O' O 'N', SI
ELSEIF DS = "Y" THEN
EXIT SUB
END IF
T = TA + 273.15
DEN = DENSABROPA(TA)
VIS = VISABROPA(TA) * 2000
KA = CONDTERAIRB(TA)
C = CEABROPA(TA)
PCOMT = PCOM * 1.3312E-03 * 760
P = PA * 1.3312E-03
TP = (TA + 273.15 + TB) / 2

```

FALLA DE ORIGEN


```

DENL = DENL(QVC, M)
DENV = DENV(ANYA, M, TP, TC, PC, W)
ENTCON = ENTALPIA(D, PCUNT, TCON, W, PC, TC) * 1000
ENTBER = ENTALPIA(D, P, TA, W, PC, TC) * 1000
ENTV = ENTV(FC, TR, PC) * 1000 / M
DAB = COEF(DIF, TR, TA, PA, VC) / 100 * 2
ALFA = 361.67 - 34.75 D
KA = COM(DES, AIRE, TA)
KS = 33
WIM (GRADO C)
CALVAP = (ENTCON - ENTBER) / ENTV
MO = DENL * (PI / Q) * L * 2 * 603
A = (PI / Q) * L * 2
RE = L * V * DEN / VIS
PR = VIS * C / KA
SC = VIS * DAB * DEN
IF RE <= 10000 THEN
  NU = 64 * PR * (1/3) * RE ^ (1/2)
  SH = 64 * SC * (1/3) * RE ^ (1/2)
ELSE
  NU = 0.7 * PR * (1/3) * (RE * S - 15200)
  SH = 0.7 * SC * (1/3) * (RE * S - 15200)
ENDIF
TCAMBIO1 = (1 / (PI * ALFA)) * (32 * A * (TA - TB)) * 2
TCAMBIO2 = MO / V * A / L * (DAB * SH * DENV - KA / ENTV * NU * (T - TB)) * 2
TCAMBIO = (TCAMBIO1 / TCAMBIO2) / 40
QI = CALVAP * MO / TC
QCI = (KA * A * (T - TB)) / (ENTV * SOR(PI * ALFA * T))
QCI = KA * NU * A * (T - TB) / (ENTV * L)
QC = QCI * QCI
QV = DAB * SH * A / L * DENV
DO
IF CALVAP >= 1 THEN
  QVAP = CALVAP * MO
  CLS
  COLOR 12
  CENTRA 'EN ESTE CASO, SOLO HAY VAPORIZACION INSTANTANEA': 4
  LOCATE 10, 10
  PRINT 'GASTO DE VAPORIZACION = ', QVAP, ' Kg/s'
  LOCATE 11, 10
  PRINT 'VAPORIZACION INSTANTANEA'
  AREA = PI * A * L * 2
  Q = (QCI * DEN * V * TB) / ((10 * L) * 11)
  LOCATE 15, 10
  PRINT 'GASTO VAPORIZADO SEGUN SUTTON = ', Q * AREA, ' kg/s'
  F3 = INPUT('')
  FIN
  EXIT SUB
ELSEIF CALVAP < 0 THEN
  ALARMA
  MENSAJE 'ALGUN DATO ES ERRONEO', 11
  FIN
  EXIT SUB
ELSE
  IF TCAMBIO < 1 THEN
    TT = (MO - CALVAP * MO) / QV
    CLS
    COLOR 12
    CENTRA 'EN ESTE CASO, UNA PARTE SE VAPORIZA INSTANTANEAMENTE': 4
    CENTRA 'PARA LOGRO FORMAR UN ESPESOR QUE SE EVAPORA POR CONVECCION FORZADA': 5
    CENTRA 'DEBIDA AL VIENTO QUE SOPLA SOBRE EL DERRAME': 6
    LOCATE 10, 10
    PRINT 'EMISION ENTRE 0 Y ', TCAMBIO, ' m/minos = ', QI, ' Kg/s'
    LOCATE 11, 10
    PRINT 'VAPORIZACION INSTANTANEA'
    LOCATE 13, 10
    PRINT 'EMISION ENTRE ', TCAMBIO, ' Y ', TT / 60, ' m/minos = ', QV, ' Kg/s'
    LOCATE 14, 10
    PRINT 'VAPORIZACION POR CONVECCION FORZADA'
    LOCATE 16, 10
    PRINT 'VAPORIZACION TOTAL = ', QI + QV, ' Kg/s'
    AREA = PI * A * L * 2
    Q = (QCI * DEN * V * TB) / ((10 * L) * 11)
    LOCATE 18, 10
    PRINT 'GASTO VAPORIZADO SEGUN SUTTON = ', Q * AREA, ' kg/s'
    F3 = INPUT('')
    FIN
    EXIT SUB
  ELSE
    QI = CALVAP * MO / L
    IF (MEI, L, TA, TR, TC, PC, M) = QI * 1 THEN
      TT = (MO - MEI * TCAMBIO, L, TA, TR, TC, PC, M) / QV * TCAMBIO
      CLS
      COLOR 12
      CENTRA 'EN ESTE CASO, NO HAY VAPORIZACION INSTANTANEA, SI NO': 4
      CENTRA 'QUE DE INMEDIATO SE FORMA UN ESPESOR QUE SE EVAPORA POR CONDUCCION': 5
      CENTRA 'DEBIDA AL FLUIDO DE CALOR DEL SUELO Y LA ATMOSFERA Y POR ULTIMO': 6
      CENTRA 'LA EMISION ES POR CONVECCION FORZADA DEBIDA AL VIENTO QUE SOPLA': 7
      CENTRA 'SOBRE AL SUPERFICIE DEL DERRAME': 7
      LOCATE 10, 10
      PRINT 'EMISION ENTRE 0 Y ', TCAMBIO, ' m/minos = ', QC, ' Kg/s'
      LOCATE 11, 10
      PRINT 'VAPORIZACION INSTANTANEA'
      LOCATE 13, 10
      PRINT 'EMISION ENTRE ', TCAMBIO, ' Y ', TT / 60, ' m/minos = ', QV, ' Kg/s'
      LOCATE 14, 10
      PRINT 'VAPORIZACION POR CONVECCION FORZADA'
      LOCATE 16, 10

```

FALLA DE ORIGEN

```

PRINT "VAPORIZACION TOTAL = ", QC + QV, "Kg/s"
AREA = PI * L * L * 2
Q = (0.0234 * DEN * V * TB) / ((10 * L) ^ 11)
LOCATE 14, 10
PRINT "GASTO VAPORIZADO SEGUN SUTTON = ", Q * AREA, "Kg/s"
PI = (PI * 3.14159)
FIN
EXIT SUB
ELSE
IF MEL, TT, L, TA, TB, TC, PC, MO = 0 THEN
TT = (MO * CALVAP * MO - MEL / (TCAMBIO, L, TA, TB, TC, PC, MO) / QV) / (TCAMBIO
CLS
COLOR 13
CENTRA "EN ESTE CASO, UNA PARTE SE VAPORIZA INSTANTANEAMENTE, 4
CENTRA "PARA LUEGO FORMAR UN ESPEJO QUE SE EVAPORA POR EL, 3
CENTRA "FLUIDO DE CALOR DEL SELO Y LA ATMOSFERA POR CONDUCCION Y, 6
CENTRA "POR ULTIMO LA EMISION SE DEBE A CONVECCION FORZADA POR, 3
CENTRA "EL VIENTO QUE SOPLA SOBRE LA SUPERFICIE DEL DEARRAMP, 4
LOCATE 10, 10
PRINT "EMISION ENTRE 0 Y 1 minutos = ", Q1, "Kg/s"
LOCATE 11, 10
PRINT "VAPORIZACION INSTANTANEA"
LOCATE 13, 10
PRINT "EMISION ENTRE 1 minutos Y ", TCAMBIO, " minutos = ", QC, "Kg/s"
LOCATE 14, 10
PRINT "VAPORIZACION DEBIDA A DIFERENCIAS DE TEMPERATURA"
LOCATE 16, 10
PRINT "EMISION ENTRE ", TCAMBIO, " Y ", TT / 60, " minutos = ", QV, "Kg/s"
LOCATE 17, 10
PRINT "VAPORIZACION POR CONVECCION FORZADA"
LOCATE 19, 10
PRINT "VAPORIZACION TOTAL = ", Q1 + QC + QV, "Kg/s"
PI = (PI * 3.14159)
AREA = PI * L * L * 2
Q = (0.0234 * DEN * V * TB) / ((10 * L) ^ 11)
LOCATE 21, 10
PRINT "GASTO VAPORIZADO SEGUN SUTTON = ", Q * AREA, "Kg/s"
FIN
EXIT SUB
ELSE
TTA = KA * NU * A * (TA - TB) / (ENTV * L)
TTB = (C * KS * A * (TA - TB) / (ENTV * SQRTPI * ALFA)) + ALFA
TTC = MO * CALVAP * MO * QV * KS * A * (TA - TB) / (ENTV * SQRTPI * ALFA) + SQRTPI
TTD = TTA + TTB
TTE = TTA + TTB
IF (TTB ^ 2 + 4 * TTA * TTD) < 0 THEN
MENSAJE "ALGUN DATO ES EQUIVOCADO", 11
ELSE
TT = (TTC - SQRT(TTC ^ 2 + 4 * TTA * TTD)) / (2 * TTA)
CLS
COLOR 13
CENTRA "EN ESTE CASO, UNA PARTE SE VAPORIZA INSTANTANEAMENTE, 4
CENTRA "PARA LUEGO FORMAR UN ESPEJO QUE SE EVAPORA POR EL, 3
CENTRA "FLUIDO DE CALOR DEL SELO Y LA ATMOSFERA POR CONDUCCION, 6
COLOR 10
LOCATE 10, 10
PRINT "EMISION ENTRE 0 Y 1 minutos = ", Q1, "Kg/s"
LOCATE 11, 10
PRINT "VAPORIZACION INSTANTANEA"
LOCATE 13, 10
PRINT "EMISION ENTRE 1 minutos Y ", TT / 60, " minutos = ", QC, "Kg/s"
LOCATE 14, 10
PRINT "VAPORIZACION DEBIDA A DIFERENCIAS DE TEMPERATURA"
LOCATE 16, 10
PRINT "VAPORIZACION TOTAL = ", QC + Q1, "Kg/s"
AREA = PI * L * L * 2
Q = (0.0234 * DEN * V * TB) / ((10 * L) ^ 11)
LOCATE 18, 10
PRINT "GASTO VAPORIZADO SEGUN SUTTON = ", Q * AREA, "Kg/s"
PI = (PI * 3.14159)
FIN
EXIT SUB
END IF
END IF
END IF
END IF
LOOP
END SUB

FUNCTION CEAIR (TA)
*****
* ESTA FUNCION CALCULA EL CALOR ESPECIFICADO EN FUNCION
* DE LA TEMPERATURA PARA EL AIRE
*****
T = TA + 273.15
A = 3.91220648
B = 0.005547368479
C = 0.00001365428288
E = 0.0000126
C = (A + B * T + C * T ^ 2) * E
CEAIR = C
END FUNCTION

```

FALLA DE ORIGEN

SUB CENTRA (TEXTOS, R)

.....
 *ESTA SUBRUTINA CENTRA EL TEXTO EN EL RENGLO N Y LO IMPRIME

L = LEN(TEXTOS)
 C = R - L / 2
 LOCATE R, C
 PRINT TEXTOS
 END SUB

SUB CENTRAP (TEXTOS, R)

.....
 *ESTA SUBRUTINA CENTRA EL TEXTO EN EL RENGLO N Y LO IMPRIME

L = LEN(TEXTOS)
 C = 25 - L / 2
 LOCATE R, C
 PRINT TEXTOS

END SUB

SUB CLAXON (ALTO, BAJO)

.....
 * ESTA SUBRUTINA PRODUCE DOS SONIDOS ALTERNADOS

FOR I = 0 TO 1
 SOUND ALTO, 3
 SOUND BAJO, 3
 NEXT I
 END SUB

FUNCION COEFDF (M1, TB, TA, PA, VC)

.....
 * ESTA FUNCION CALCULA EL COEFICIENTE DE DIFUSION
 DE UN GAS EN OTRO

M1 = 29 * g/mol
 VB = (V * 1.048) * 385
 A = 1.06036
 B = .1361
 C = .193
 D = .47635
 E = 1.91387
 F = 1.2096
 G = 1.7674
 H = 3.89411
 T = TA + 273.15
 TP = (T + TB) / 2
 SIGMA12 = (3.02 + 1.18 * VB * (1 / 3)) / 2
 M12 = 2 * (1 / M1) + (1 / M2) - 1
 EP12 = (37 * (15 * TB) * (1 / 2))
 TS = TP / EP12
 OMEGA1 = A / (TS * B)
 OMEGA2 = C / EXP(D * TS)
 OMEGA3 = E * EXP(F * TS)
 OMEGA4 = G / EXP(H * TS)
 OMEGA = OMEGA1 + OMEGA2 + OMEGA3 + OMEGA4
 F = PA * (1.3122E-03)
 DIFA = (0.01 - JB / M12 * (1 / 2)) * ((0 * 3) * TP * D / 2)
 DIFB = F * M12 * (1 / 2) * SIGMA12 * 2 * OMEGA
 DIF = DIFA / DIFB
 COEFDF = DIF
 END FUNCTION

FUNCION CONDTERAIRE (TA)

.....
 * ESTA FUNCION CALCULA LA CONDUCTIVIDAD TERMICA EN FUNCION
 DE LA TEMPERATURA PARA UNA MEZCLA DE DOS GASES CON LA
 ECUACION DE VASSELEWA

P1 = 33.9 * BARES
 T1 = 156.2 K
 Z1 = .29
 M1 = 28.013 g/mol
 D1 = 0
 P2 = 50.4 * BARES
 T2 = 154.6 K
 Z2 = .288
 M2 = 31.999 g/mol
 D2 = 0
 V1 = .79
 V2 = 1 - V1
 REL = (V1 * SEM(TA, P1, T1, Z1, M1, D1) + V2 * SEM(TA, P2, T2, Z2, M2, D2)) * (M1 / M1)
 AA12 = (1 + REL * (1 / 2)) * (M1 / M2) * (1 / 4) * 3
 AB12 = (1 + (1 + M1 / M2)) * (1 / 2)

FALLA DE ORIGEN

```

A12 = AA12 / AB12
AA21 = (1 + (1 / RE2)) * (1 / 2) * (M2 / M1) * (1 / 40) ^ 2
AB21 = (1 + M2 / M1) * (1 / 2)
A21 = AA21 / AB21
K1 = (CONDUCTELEM(TA, .003173, 9.966E-05, -3.741E-06, 9.731E-11)) / 100
K2 = (CONDUCTELEM(TA, .003919, 9.816E-05, -5.067E-06, 1.504E-11)) / 100
KA = (Y1 * K1) / (Y1 + Y2 * A12) + (Y2 * K2) / (Y2 + Y1 * A21)
CONDUCTELEM = KA / 100
END FUNCTION

```

FUNCTION CONUTERELEM (TA, A, R, C, D)

 * ESTA FUNCION CALCULA LA CONDUCTIVIDAD TERMICA
 * DE UNA SUSTANCIA, EN FUNCION DE LA TEMPERATURA

```

T = TA + 273.15
K = A + B * T + C * T ^ 2 + D * T ^ 3
CONDUCTELEM = K
END FUNCTION

```

SUB CUADRO (a1, y1, a2, y2, C) STATIC

 * ESTA SUBROUTINA HACE UN CUADRO DE COLOR C ACOTADO POR X1,X2,Y1 y Y2

COLOR C

```

aa = a1
ab = a2
IF a2 < a1 THEN
  aa = a2
  ab = a1
END IF
ya = y1
yb = y2
IF y2 < y1 THEN
  ya = y2
  yb = y1
END IF
n = ab - aa
m = STRLEN(n) / 2
ns = STRLEN(m) / 2
nv = yb - ya - 1
ms = " "
ms2 = "A"
ms3 = " "
LOCATE ya, aa - 1
PRINT ms,
PRINT ms,
FOR i = 1 TO nv
  LOCATE ya + i, aa - 1
  PRINT ns
  LOCATE ya + i, ab
  PRINT m
NEXT i
LOCATE ya, aa - 1
PRINT ms,
PRINT ns,
PRINT ms3
COLOR T
END SUB

```

FUNCTION DENAIR (PA, TA)

 * ESTA FUNCION CALCULA LA DENSIDAD DEL AIRE EN FUNCION DE
 * LA TEMPERATURA Y LA PRESION ATMOSFERICA

```

DEN = (PA / 760 * 29) / (0.02 * (TA + 273.15))
DENAIR = DEN
END FUNCTION

```

FUNCTION DENLIQ (VC, M)

 * ESTA FUNCION CALCULA LA DENSIDAD DEL LIQUIDO DERRAMADO
 * A UNA TEMPERATURA T2 A PARTIR DE UN DATO CONOCIDO

```

VB = 285 * VC ^ 1.048
DEN2 = 1 / VC
DEN3 = DEN2 * 1000 * M
DENLIQ = DEN3
END FUNCTION

```

FUNCTION DENVAP (PA, M, TP, TC, PC, W)

 * ESTA FUNCION CALCULA LA DENSIDAD DEL VAPOR SATURADO
 * DE LA SUSTANCIA DERRAMADA

FALLA DE ORIGEN

```

Z = ZETA(TC, PA, PC, W)
P = PA / 760
DEN = (P + 34) / (Z * 0.001 * TP)
DENVAP = DEN
END FUNCTION

```

```

SUB DETENTE (TS)

```

```

* ESTA SUBROUTINA HACE UNA PAUSA DE TS SEGUNDOS

```

```

T = TIMER + TS
DO
LOOP UNTIL TIMER > T
END SUB

```

```

FUNCTION ENTALPIA (M, PA, TA, W, PC, TC)

```

```

* ESTA FUNCION CALCULA LA ENTALPIA A UNA PRESION Y TEMPERATURA DADAS,
* CON LA ECUACION DE SOAVE

```

```

P = PA * 760
Z = ZETA(TA, TC, P, PC, W)
P = PA * 760 * 1.3332E-03
T = TA + 273.15
TR = T / TC
R = R314
FW = 44 + 1.574 * W * .17 * W ^ 2
A = (.42784 * (1 + FW * (1 - TR ^ .5)) ^ 2) * R * 2 * TC ^ 2 / PC
B = .06664 * R * TC / PC
PAR = R * FW * (1.4574 * A + TC / (T * PC)) ^ (1 / 3)
BS = (B * P) / (R * T)
DEN = (DEN * T) * B
DHA = (T / DEN) * PAR - A / DEN * (LOG(Z * 41 * BS)) / (Z + 1.414 * BS))
DHB = R * T * (Z - 1)
DHT = DHA - DHB
DH = DHT / (M * 10)
ENTALPIA = DH
END FUNCTION

```

```

FUNCTION ENTVPAP (TC, TR, PC)

```

```

* ESTA FUNCION CALCULA LA ENTALPIA DE VAPORIZACION DE
* LA SUSTANCIA DETERMINADA EN SU PUNTO DE ENGLUCION
* POR EL METODO DE VETTERE

```

```

R = R314
TRR = TR / TC
ENT1 = R * TC * TRR * (.4341 * LOG(PC) - .6943) + .89584 * TRR)
ENT2 = .37891 - .37906 * TRR + .15075 * PC ^ -1 * TRR ^ -2
ENT = ENT1 / ENT2
ENTVPAP = ENT
END FUNCTION

```

```

SUB FALLAS (BANDERA, NOMBRES)

```

```

* ESTA SUBROUTINA EMITE MENSAJES SI SE COMETE UN ERROR PARA
* QUE EL PROGRAMA NO SE DETENGA.

```

```

ALARMA
BANDERA = 0
SELECT CASE ERR
CASE 1) 'NO ESTA EL ARCHIVO
    MENSAJE "EL ARCHIVO NO SE ENCUENTRA", TS
    PASO = -1
END SELECT
DO
MENSAJE "ESTA EQUIVOCADA LA FORMULA? (S/N)", IS
RS = UCASE$(RS)
SELECT CASE RS
CASE "S"
    EXIT SUB
CASE "N"
    SUBSTANCIA (NOMBRES)
    EXIT SUB
CASE ELSE
    MENSAJE "PRESIONE 'S' O 'N'", IS
END SELECT
LOOP
CASE ELSE
    MENSAJE "HAY UN ERROR NO DEFINIDO", IS
DO
MENSAJE "DESEA VOLVER A EMPEZAR? (S/N)", OS
OS = UCASE$(OS)
IF OS = "S" THEN
    EXIT SUB
ELSEIF OS = "N" THEN
    FIN

```

FALLA DE ORIGEN

```

ELSE
MENSAJE "PRESIONE S O N", IS
END IF
LOOP
END SELECT
END SUB
SUB FIN
*****
ESTA SUBROUTINA TERMINA EL PROGRAMA
*****
DO
MENSAJE "DESEA SIMULAR OTRA SUSTANCIA? (S/N); IS
SELECT CASE UCASE$(R)
CASE "N"
CLS
CLAXON 987, 329
COLOR 7
END
CASE "S"
EXIT SUB
CASE ELSE
MENSAJE "PRESIONE S O N", IS
END SELECT
LOOP
END SUB
SUB GRAFDATOS (LQ, QO, QV90, TD, N, x1, x2, y1, y2)
*****
ESTA SUBROUTINA GRAFICA LA EXTENSION DEL DERRAME
*****
SCREEN 12
XM = (x2 - x1) / 2
YM = (y2 - y1) / 2
H = 0
DO
IF LQ > 44 THEN
da = 136
ELSE
da = LQ * 2.1
END IF
CIRCLE (QO, YM), da, 9
IF LQ > 44 THEN
R = 136
ELSE
R = LQ * 2.1
END IF
IF LQ == 2 THEN
EXIT SUB
END IF
COLOR 10
LOCATE 11, 7
PRINT "DIAMETRO DEL DERRAME = ", LQ, "mm"
LOCATE 11, 7
PRINT "AREA SUPERFICIAL DEL DERRAME = ", PI / 4 * LQ * 2, "cm^2"
LOCATE 11, 7
PRINT "DIAMETRO DE VAPORIZACION"
LOCATE 11, 7
PRINT "DIAMETRO DE VAPORIZACION SEGUN SUTTON"
LOCATE 11, 7
PRINT QV90, "kg/h"
LOCATE 11, 7
PRINT "TIEMPO TRANSCURRIDO"
LOCATE 11, 7
PRINT TD / 60, "min"
CIRCLE (QO, YM), R, 9
PAINT (QO, YM), R, 9
DETENTE 1
CIRCLE (QO, YM), R, 0
PAINT (QO, YM), R, 0
COLOR 17
LOCATE 11, 7
PRINT "presione 'PAUSA' para detener la imagen y una tecla para continuar"
LOCATE 11, 7
PRINT "O presione cualquier tecla para terminar la simulacion"
H = H + 1
LOOP WHILE INKEY IS = "" OR ABS(1 - H) <= .0001
END SUB
SUB GRAFICA (XO, YO, x1, x2, y1, y2, C, N)
*****
ESTA SUBROUTINA GRAFICA EL DIAMETRO
DEL DERRAME EN FUNCION DEL TIEMPO
*****
XMEN = MIN(XO, N)
XMAX = MAX(XO, N)
YMAX = MAX(YO, N)
SCREEN 12
CENTRA "GRAFICA DEL DIAMETRO DEL DERRAME", 3

```

FALLA DE ORIGEN

```

CENTRA "EN FUNCION DEL TIEMPO", 4
LOCATE 4,1
PRINT "DIAMETRO (m)"
LOCATE 22,40
PRINT "TIEMPO (min)"
mc1 = (XMAX - XMIN) / 6
mc2 = (YMAX - YMIN) / 6
FOR T = 0 TO 6 STEP 1
  COLOR 7
  LOCATE 3 * T + 7, 6
  PRINT USING "### ##", (Y(T) - mc2 * T)
  COLOR 1
  LOCATE 3 * T + 7, 13
  PRINT STRING$(1, 196)
NEXT T
FOR F = 0 TO 10
  COLOR 7
  LOCATE 24, 5 * F + 11
  ABSI = (X(T) + mc1 * F) / 60
  PRINT USING "### ##", ABSI
  COLOR 1
  LOCATE 23, 5 * F + 13
  PRINT STRING$(1, 174)
NEXT F
VIEW (41, Y1+2, Y2, 1
WINDOW (XMIN + 1 * XMIN, 0) : XMAX + 1 * XMAX, YMAX + 1 * YMAX)
PSET (401, Y(0))
FOR I = 1 TO N
  IF x(I) <= 0 THEN
    EXIT FOR
  END IF
  LINE -640, Y(I), C
NEXT I
SUB SUB
SUB GRAFICATOT (X0, Y10, Y20, A1, A2, Y1, Y2, C1, C2, N, NOM1)
*****
* ESTA SUBROUTINA GRAFICA CONJUNTAMENTE LA EMISION DEL MODELO
* Y LA EMISION CON LA ECUACION DE SUTTON
*****
XMIN = MEN(X0, N)
XMAX = MAX(X0, N)
YMAX = MAX(Y10, N)
SCREEN 12
CENTRA "GRAFICA CONJUNTA DE LA EMISION CALCULADA CON EL MODELO", 3
CENTRA "Y LA EMISION CALCULADA CON LA ECUACION DE SUTTON", 4
COLOR 14
LINE (110, 217) : (130, 217), C1
LOCATE 13, 40
PRINT "MODELO"
LINE (110, 360) : (130, 360), C2
LOCATE 17, 40
PRINT "SUTTON"
LOCATE 4, 1
PRINT "EMISION (kg)"
LOCATE 22, 44
PRINT "TIEMPO (min)"
mc1 = (XMAX - XMIN) / 6
mc2 = (YMAX - YMIN) / 6
FOR T = 0 TO 6 STEP 1
  COLOR 7
  LOCATE 3 * T + 7, 6
  PRINT USING "### ##", (Y(T) - mc2 * T)
  COLOR 1
  LOCATE 3 * T + 7, 13
  PRINT STRING$(1, 196)
NEXT T
FOR F = 0 TO 10
  COLOR 7
  LOCATE 24, 5 * F + 11
  ABSI = (X(T) + mc1 * F) / 60
  PRINT USING "### ##", ABSI
  COLOR 1
  LOCATE 23, 5 * F + 13
  PRINT STRING$(1, 174)
NEXT F
VIEW (41, Y1+2, Y2, 1
WINDOW (XMIN + 1 * XMIN, 0) : XMAX + 1 * XMAX, YMAX + 1 * YMAX)
PSET (401, Y(0))
FOR I = 1 TO N
  IF x(I) <= 0 THEN
    EXIT FOR
  END IF
  LINE -640, Y(I), C1
NEXT I
PSET (401, Y(0))
FOR I = 1 TO N
  IF x(I) <= 0 THEN
    EXIT FOR
  END IF
  DIBUJTE .1
  LINE -640, Y(I), C2
NEXT I
END SUB

```

FALLA DE ORIGEN


```

IF P1 = "1" THEN
  FIN
  EXIT SUB
ELSEIF P1 = "1" THEN
  EXIT DO
ELSE
  MENSAJE "PRESIONE '1' O '2'", P1
  END IF
  LOOP
DO
  CLS
  T = LEN("INTRODUZCA LOS DATOS DEL ")
  TS = LEN(NOM1)
  LOCATE 2, 40 - (T + TS) / 2
  COLOR 10
  PRINT "INTRODUZCA LOS DATOS DEL ";
  COLOR 11
  PRINT NOM1
  COLOR 10
  LOCATE 3, 10
  INPUT "NOMBRE = ", NOMBRE1
  LOCATE 7, 10
  INPUT "MASA MOLECULAR = ", M
  LOCATE 8, 10
  INPUT "TEMPERATURA CRITICA EN GRADOS KELVIN = ", TC
  LOCATE 11, 10
  INPUT "PRESION CRITICA EN BARES = ", PC
  LOCATE 13, 10
  INPUT "VOLUMEN CRITICO EN cm3gmo-1, VC
  LOCATE 15, 10
  INPUT "FACTOR ACENTRICO = ", W
  LOCATE 17, 10
  INPUT "TEMPERATURA NORMAL DE EMULSION EN GRADOS KELVIN = ", T0
  LOCATE 19, 10
  INPUT "TEMPERATURA DE ALMACENAMIENTO EN GRADOS CENTIGRAOS = ", T00N
  LOCATE 21, 10
  INPUT "PRESION DE ALMACENAMIENTO EN ATMOSFERAS = ", POON
  NOMBRES = UCASE(NOMBRE1)
  MENSAJE "LOS DATOS SON CORRECTOS (S/N)?, D1
  D1 = UCASE(D1)
  IF D1 <> "S" AND D1 <> "N" THEN
    ALARMA
    MENSAJE "PRESIONE '0' O '2'", D1
  END IF
  LOOP UNTIL D1 = "S"
  N1 = LF(FIX(NOM1, 8))
  OPEN N1 = "DAT" FOR OUTPUT AS #1
  WRITE #1, NOMBRES, M, TC, PC, VC, W, T0, T00N, POON
  CLOSE #1
  MENSAJE "INICIA LA SIMULACION (S/N)", U1
  U1 = UCASE(U1)
  IF U1 <> "S" THEN
    EXIT SUB
  ELSEIF U1 = "N" THEN
    FIN
  EXIT SUB
END IF
END SUB

```

SUB TAMANO (TEXTOS, #1, #2)

 * ESTA SUBROUTINA MIDE LOS CARACTERES DE UN MENSAJE "TEXTOS"
 * E INDICA LAS COORDENADAS PARA CENTRALIZLO

```

T = LEN(TEXTOS)
X1 = 40 - T / 2
X2 = 40 + T / 2
END SUB

```

FUNCTION VISAIRE (TA)

 * ESTA FUNCION CALCULA LA VISCOSIDAD DEL AIRE POR
 * EL METODO DE REICHENBERG PARA DOS COMPONENTES

```

P1 = 31.9 "BARES"
T1 = 124.2 "K"
M1 = 28.013
D1 = 0
P2 = 30.4 "BARES"
T2 = 144.4 "K"
M2 = 31.999
D2 = 0
X1 = .79
TRC = (TA + 273.15) / ((T1 * T2) ^ (1 / 2))
Y1 = 1 - X1
T = TA + 273.15
TR1 = T / T1
TR2 = T / T2
DRI = (32.46 * D1 + 2 * P1) / T1 ^ 2
DRI = (32.46 * D2 + 2 * P2) / T2 ^ 2
UA = (1 + .36 * TR1 * (TR1 - 1)) / (1 + .01 / (TR1 ^ (1 / 2)))
UB1 = (TR1 + 3.3 + 10 * T ^ 2) / (TR1 ^ 3.5 * (1 + 10 * T ^ 2 * DRI ^ 2))

```

FALLA DE ORIGEN

```

U1=UAI*UBI
UA2=(1+.36*TR2+(TR2-11)*(1/60)/(TR2*(1/2))
UB1=(TR2*.15+10**DR2*7)/(TR2*.15*(1+10**DR2*7)
U2=UAI*UB1
VISCOSI=VISELEM*TA.33.136.2.75.2013.0)
VISCOSI=VISELEM*TA.50.4.154.6.200.31999.0)
C1=(M1*(1/40)/(VISCOSI**1/3))*(1/2)
C2=(M2*(1/40)/(VISCOSI**1/3))*(1/2)
HA=(M1*M2)/(C1*C2*(M1+M2)**1/2)
HB=(1+.36*TRC+TRC-11)*(1/60)/(TRC*(1/2))
H=HA*(C1+C2)*.2*HB
KA1=Y1+VISCOSI
KB1=Y1+VISCOSI*.2*H+C*(2*M1/M2)
K1=KA1/KB1
KA2=Y2+VISCOSI
KB2=Y2+VISCOSI*.3*H+C*(2*M1/M2)
K2=KA1/KB2
VA=K1*(1+H*.2*.62*.2)-K2*(1+.2*H*K1+.1*3*K1*3)
VISAKE=VA
END FUNCTION

```

FUNCTION VISELEM (TA, P, T, Z, M, D)

 * ESTA FUNCION CALCULA LA VISCOSIDAD DE UN GAS INDIVIDUAL
 * POR EL METODO DE LUKAS

```

TR=(TA+273.15)/T
DR=.3146*(D**2)*P/(T*.20)
SELECT CASE DR
CASE 0 TO .02
  FP=1
CASE .02 TO .075
  FP=1+.3035*(.20-Z)**1.72
CASE DR > .075
  FP=1+.3035*(.20-Z)**1.72*ABS(96+.1*(TR-.7))
END SELECT
EP=176*(T/DM)**.3*.41*(1/6)
VIE=(1/80)*TR*.418*.35*EXP(.499*TR)+.34*EXP(.654*TR)+.818)*FP/EP
VISELEM=VIE
END FUNCTION

```

FUNCTION ZETA (TA, TC, PA, PG, W)

 * ESTA FUNCION CALCULA EL COEFICIENTE DE COMPRESIBILIDAD
 * CON LA ECUACION DE ESTADO DE IGALLE

```

US=1
WS=0
T=TA+273.15
TR=T/TC
Z=Z14
P=PA*.0013322
FW=.48+.1274*W+.1*W**2
A=(.4218*(1-FW**1-TR*.3))**2*R**2+TC**2/PC
B=(.066+R*TC)/PC
CA=A**2/(R**2*T**2)
CB=B**2/(R**2)
A1=1+CB*US**CB
B1=CA+WS**CB**2-US**CB*US**CB**3
C1=CA**CB+WS**CB**2+WS**CB**3
Z=1
N=0.00001
DO
  FX=(Z**3-A1*Z**2+B1*Z-C1)
  dx=((Z+10)**3-A1*(Z+10)**2+B1*(Z+10)-C1)/(FX)/N
  Z=Z-FX/dx
LOOP UNTIL ABS(Z1-Z)<1E-10
ZETA=Z
END FUNCTION

```

FALLA DE ORIGEN