

Anexo 3

Sistemas de transporte

El anexo III presenta un directorio de modelos de dispersión junto con una breve descripción de las aplicaciones informáticas comerciales relacionadas con accidentes químicos con consecuencias medioambientales.

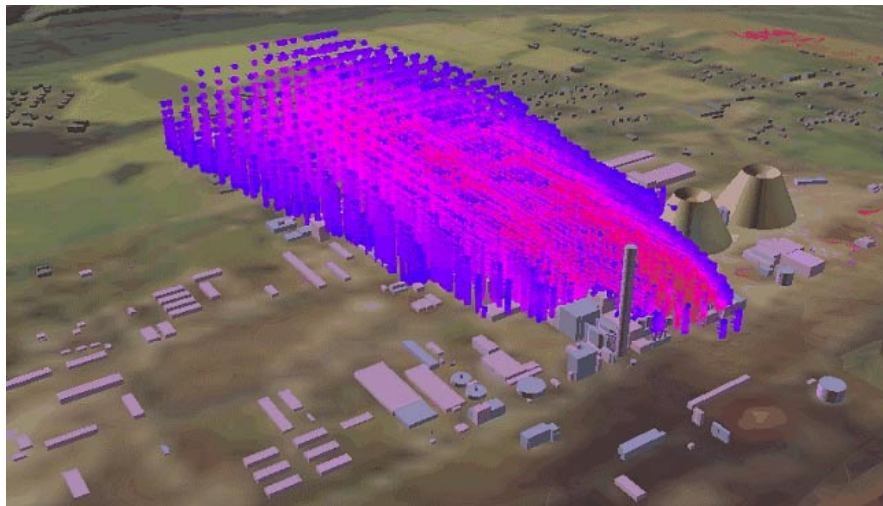
GASES EN GASES

Los modelos de dispersión atmosférica estiman de forma teórica la distribución espacial de concentraciones de contaminantes emitidos al exterior por una fuente conocida, una fuga, una explosión o cualquier otro tipo de accidente.

Para plantear las emisiones se establecen escenarios de accidentes, por ejemplo una fuga de un centímetro de diámetro de un contaminante determinado en un tanque o conducción en el que se conoce la presión del gas en cuestión. El modelo requiere información sobre el medio, corrientes de aire, presión exterior, temperatura, orografía, etc.

FIGURA A

Ejemplo de salida gráfica de un modelo de dispersión atmosférica.



Características principales: los modelos destinados al estudio de riesgos medioambientales deben contemplar los efectos de topografía y edificios, ser adaptables al contaminante modelizado, así como ayudar a delimitar zonas seguras para transportes peligrosos o inflamables.

Las herramientas o modelos empleados pueden arrojar resultados diferentes en función de las hipótesis y algoritmos de cálculo en que se basan cada uno de ellos.

La correcta definición del alcance, condiciones climáticas y geográficas puede ayudar a definir los límites de aplicación del modelo óptimo para cada caso. En particular, hay situaciones en las que los efectos climáticos puntuales (atmósferas muy estables, valles con vientos muy direccionados, etc.) siguen patrones de comportamiento muy singulares no exportables a otras condiciones.

Tipos de modelos

Los modelos más sencillos se basan en algoritmos de conservación, transporte y deposición de fluidos, considerando que las condiciones son iguales en la totalidad del área estudiada.

Modelos más complejos dividen el espacio en celdas (el volumen queda dividido en celdas tridimensionales) y en cada una se consideran unas condiciones particulares. El contaminante va pasando de una celda a la celda adyacente y puede sufrir transformaciones en función al cambio de condiciones. Estos modelos son dinámicos y requieren un módulo climático más complejo, por lo que resultan más complicados de aplicar, y por lo tanto más costosos, siendo también más precisos en sus estimaciones.

A continuación se indica una clasificación de los modelos de dispersión en función a las hipótesis y algoritmos en los que se fundamentan.

A) Modelo gaussiano

Modelo sencillo en el que se contemplan datos meteorológicos comunes para todo el área de estudio y considera los efectos de la topografía, edificios, etc.

El modelo se basa en la fórmula de distribución de Gauss, y está recomendado para contaminantes no reactivos. Emplea cálculos relativamente sencillos para estimar las concentraciones que se encuentran lejos del centro de la pluma, asumiendo una distribución gaussiana.

Este modelo pierde su eficacia a largas distancias (superiores a los 50 km) y para la modelización de contaminantes reactivos.

B) Modelo euleriano

En este tipo de modelos se analiza el comportamiento de los compuestos químicos en relación con un sistema fijo de coordenadas, analizando la evolución a lo largo del espacio a través de algoritmos de conservación de masa y calor y de las transformaciones químicas que puedan sufrir.

Es bastante más preciso y costoso, recomendado para contaminantes reactivos y situaciones complejas.

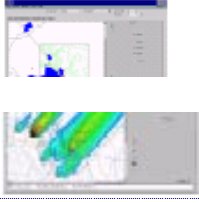
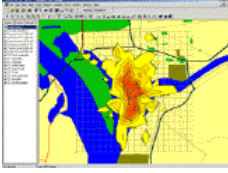






C) Modelo lagrangiano

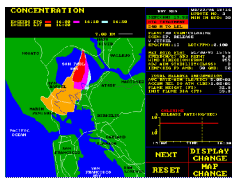
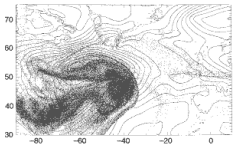
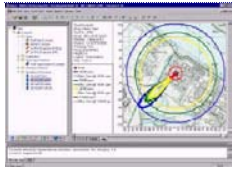
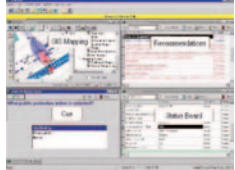
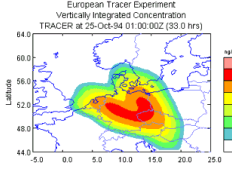



Basándose en el estudio de fluidos, analiza el comportamiento de los compuestos químicos desde un sistema de referencia que acompaña el movimiento del fluido.

Modelo complejo recomendado para situaciones en las que intervengan sustancias altamente peligrosas.

Diferentes modelos existentes en el mercado

La siguiente tabla ha sido concebida para facilitar la elección por parte del industrial de una serie de modelos de referencia presentes en el mercado, destinados al análisis de fugas y accidentes a la atmósfera. Todos ellos contemplan la topografía, barreras y efectos producidos por edificios.

Modelo	Salida gráfica/ logotipo	Público/ privado	Empresa y comentarios
Aria Risk		Privado	<i>ARIA Technologies</i> , modelo gaussiano para accidentes industriales y terrorismo.
BREEZE HAZ		Privado	<i>Trinity Consultants of Dallas</i> , modelo gaussiano para fugas y emisiones. Aplica los modelos AFTOX DEGADIS INPUFF y SLAB con formato de Windows. http://www.breeze-software.com/Content/Products/Haz/BREEZE_haz_products.asp
CAMEO		Público	<i>NOAA</i> , especial para accidentes químicos de gases inflamables y pesados. Diseñado para planificar intervenciones en accidentes. http://www.epa.gov/ceppo/cameo/
DEGADIS		Público	<i>EPA/Gas Research Institute or the American Petroleum Institute</i> . Modelo euleriano para gases densos (aplicación especial para Gas Natural Licuado), modeliza la dispersión en cortos períodos de tiempo y define las áreas de exposición con concentraciones que superen los niveles establecidos. http://www.epa.gov/scram001/tt22.htm#rec
CalDESK/ CAMxDESK		Privado demo de 15 días	<i>EnviroModeling Ltd. (Chile)</i> , adaptación del <i>Calpuff</i> con un módulo fotoquímico. http://www.enviromodeling.com/home.html
CALPUFF		Público	<i>EPA (Earth Tech Atmospheric Studies Group)</i> modelo californiano para un amplio rango de opciones (en entorno MSDOS). http://www.src.com/calpuff/calpuff1.htm
FLACS		Privado	<i>GexCon AS</i> , de modelización de explosiones, principalmente de gases en áreas complejas. http://www.gexcon.com/
INPUFF		Público	Desarrollado por la EPA para un único foco de gases no reactivos y terreno plano, este modelo suele incorporarse como integrante de otros más completos. Ha sido empleado para estudios de olores. http://www.epa.gov/asmdnerl/files.html

Modelo	Salida gráfica/ logotipo	Público/ privado	Empresa y comentarios
MIDAS		Privado	<i>PLG Inc.</i> Adaptado a contaminantes peligrosos y radiactivos http://www.plg.com/pages/model.html
NAME		Público	<i>National Meteorological Center of the UK's Met. Office at Bracknell, Berkshire.</i> Modeliza accidentes con emisiones puntuales y de larga duración (accidentes nucleares), con una verdadera simulación del comportamiento de partículas. Se adapta a extensiones de terreno grandes, con opción de animamientos de mallas menores y a un amplio rango temporal. http://www.met-office.gov.uk/research/nwp/publications/nwp_gazette/3rd96/name2.html
PHAST		Privado	<i>Det Norske Veritas</i> , modeliza varios tipos de accidentes: incendios, explosiones de nubes gaseosas, etc., en instalaciones industriales. http://www2.dnv.com/software/Products/Risk_Management/phast.htm
QuikPlume (PlantSafe)		Privado	<i>GEOSphere Systems</i> , sistema de toma rápida de decisiones, que incorpora un modelo de dispersión. http://www.geospheresystems.com/product/plantsafe.html
SCIPUFF		Público	<i>Titan Systems Corporation</i> , modelo lagrangiano empleado para sistemas de Defensa y Seguridad Nacional http://www.4dwx.org/software/scipuff.html
SCREEN 3		Público	<i>EPA</i> , modelo gaussiano que calcula concentraciones máximas superficiales para focos puntuales, antorchas, áreas y volúmenes. Es la versión de análisis de escenarios del modelo ISC (Industrial Source Complex). http://www.epa.gov/scram001/tt22.htm#rec
SCREEN VIEW		Privado	<i>Lakes Environmental Software</i> , Interfaz para utilizar el SCREEN 3 de la EPA, analiza los posibles peores escenarios para el estudio de accidentes, explosiones, etc. http://www.weblakes.com/lakescr1.html
TRACE		Privado	<i>Safer Systems L.L.C.</i> , Camarillo, California, modelo adaptable a una industria, un polígono, ciudad o toda una región. Ofrece análisis de riesgos integrales de maquinaria, transporte, conducciones explosiones de contaminantes químicos, sustancias tóxicas, malos olores, etc. http://www.safersystem.com/

Otros modelos públicos de la EPA en <http://www.epa.gov/scram001/tt22.htm#rec>

Otros modelos que sin ser de la EPA aparecen en su base de datos en <http://yosemite.epa.gov/oswer/>

LÍQUIDOS EN LÍQUIDOS

El conocimiento de los mecanismos de transporte y los fenómenos de interacción entre sustancias en estado líquido (dilución, disolución, etc.) cuando una o ambas tienen un marcado carácter peligroso, es de vital importancia para poder predecir y evaluar los riesgos que potencialmente podrían originar cuando entran en interacción estas sustancias para un conjunto variado de escenarios.

Como consecuencia de los accidentes del tipo «líquidos en líquidos», se pueden producir interacciones de una sustancia química líquida, más o menos peligrosa, con el agua (p.e. aguas superficiales, aguas subterráneas, lagos, lagunas, agua de mar...).


Ejemplo: sustancia química A + agua = sustancia química A + afección a los ecosistemas.

Características principales:

- El área de afección es desconocida, difícil de determinar y variable con el tiempo de exposición en el medio.
- Los aspectos más relevantes por investigar o simular son la evolución de la pluma contaminante con el tiempo, la degradación de la sustancia en el medio afectado y los efectos sobre los medios receptores (afección de lechos fluviales, lechos marinos, efectos nocivos sobre la flora y fauna autóctona, etc.).

Diferentes modelos existentes en el mercado

A continuación se adjunta una referencia de modelos presentes en el mercado, destinados a simular los efectos de las reacciones químicas que pueden aparecer cuando entran en contacto varias sustancias, así como la evolución física de una pluma de contaminación en un medio acuático para diferentes períodos de tiempo, las repercusiones de la pluma contaminante sobre los medios afectados y las condiciones de degradación de una sustancia química en el medio acuático.

Modelo	Salida gráfica	Carácter	Empresa y comentarios
BLTM		Público	USGS. Modelo unidimensional Lagrangiano que simula distintos fenómenos de transporte y la evolución de la calidad en ríos como consecuencia de vertidos o derrames accidentales de sustancias químicas. http://smig.usgs.gov/cgi-bin/SMIC/model_home_pages/model_home?selection=rma4
CORMIX		Público	EPA. Es un modelo que simula la disminución de la calidad del agua de un medio (lagos, ríos o estuarios) como consecuencia de uno o varios puntos de vertido. http://www.epa.gov/waterscience/models/cormix.html

Modelo	Salida gráfica	Carácter	Empresa y comentarios
DYNTOX		Público	<i>EPA</i> . Modelo que simula la concentración de sustancias tóxicas en ríos y lagos producida por derrames o vertidos accidentales de contaminantes. http://www.epa.gov/owow/wtr1/tmdl/decisions/decape.html
EXAMS II		Público	<i>EPA</i> . Modelo que simula los efectos de un episodio contaminante sobre los ecosistemas fluviales. Simula los fenómenos de transporte y concentraciones previsibles para una carga contaminante determinada. http://www.epa.gov/opptintr/cahp/actlocal/pcgems/index.pdf (guía de usuario)
MIKE3		Privado	<i>DHI (Dansk Hydraulisk Institut)</i> . Modelo de dispersión para vertidos en el mar, lagos, ríos, estuarios, etc., que representa las plumas en 3D. Se trata de un modelo muy completo empleado para diversas aplicaciones de ingeniería. http://www.dhisoftware.com/mike3/index.htm
MULTIMED		Público	<i>EPA</i> . Modelo que simula fenómenos de transporte y transformaciones físico-químicas de la pluma contaminante que se produce en un medio acuático (ríos, lagos y mar), como consecuencia de un vertido continuo. http://www.epa.gov/ceampubl/mmedia/multim2/
PLUMES		Público	<i>EPA</i> . Modelo de simulación de plumas contaminantes por dilución de contaminantes a ríos y aguas marinas. Muy útil para simular fuentes actuando simultáneamente. http://www.epa.gov/ceampubl/swater/plumes/
PRAIRIE		Privado	<i>AEA Technology</i> . Modelo tridimensional para la simulación de dispersión de contaminantes en ríos y estuarios. http://www.aeat.com/netcen/airqual/netcen.html
RMA4		Público	<i>US Army Corps</i> . Es un modelo bidimensional en elementos finitos que simula procesos de transporte por advección y difusión en el agua por contaminantes de hasta seis constituyentes químicos diferentes. http://chl.wes.army.mil/software/tabs/models.htm
WASP 6.1		Público	<i>EPA</i> . Es un modelo que simula fenómenos de eutrofización, persistencia de metales y compuestos orgánicos y desarrollo de coliformes fecales en el agua, debido a vertidos o derrames accidentales de sustancias químicas. http://www.epa.gov/region4/water/tmdl/tools/wasp.htm

LÍQUIDOS EN SÓLIDOS

Este apartado se centra en los tipos de accidentes en los que se liberan sustancias en estado líquido sobre el terreno.

La modelización del flujo de aguas subterráneas y de los mecanismos de transporte de contaminantes en suelos saturados y no saturados constituye una herramienta básica y fundamental para conocer la evolución de un determinado compuesto en el medio y prever su comportamiento a lo largo de un período determinado, con vistas a una posible recuperación del medio afectado.

Un modelo matemático de simulación permite reproducir el comportamiento de un sistema natural bajo distintas situaciones.

Tipos de modelos

Los modelos que actualmente existen en el mercado para simular los distintos procesos físico-químicos que tienen lugar en el subsuelo pueden ser:

A) *Modelos físicos:*

Reproducen a escala un fenómeno natural. Problema: «efecto escala». En ocasiones no representan el comportamiento real del proceso simulado.

B) *Modelos analógicos:*

Están basados en formulaciones matemáticas simples. Problema: no admiten irregularidades o heterogeneidades. Actualmente se encuentran en desuso.

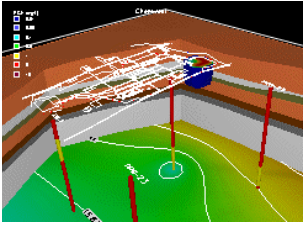
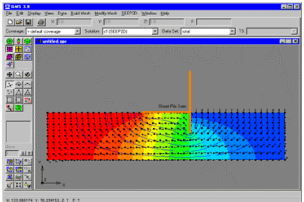
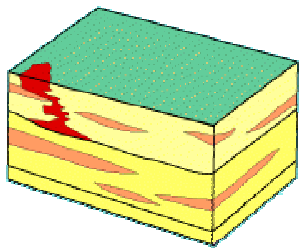
C) *Modelos numéricos:*


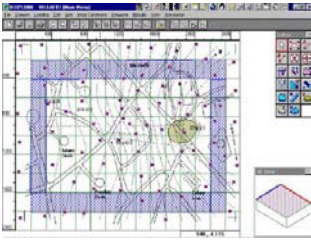
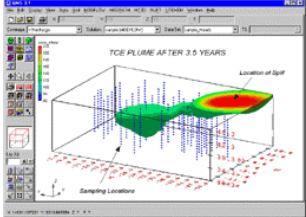
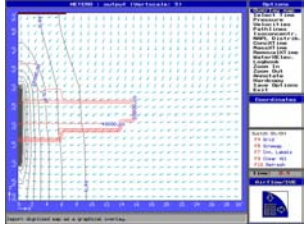
Precisan la definición de unas condiciones de contorno. Requieren una discretización espacial y temporal. Resuelven la ecuación diferencial de la continuidad mediante matrices para un conjunto de celdas predefinidas. Admiten irregularidades y heterogeneidades. Son los más utilizados. Para los riesgos que se precisaría simular, se pueden diferenciar dos (2) tipos: de flujo y de transporte en masa.

- Numéricos de flujo: Simula la distribución espacial y temporal del gradiente hidráulico en cada una de las celdas definidas.
- Numéricos de transporte en masa: Calculan la concentración y simulan la evolución espacial y temporal de una sustancia química.

Como en los apartados anteriores, en la siguiente tabla se relacionan diferentes modelos presentes en el mercado.

Diferentes modelos existentes en el mercado

Modelo	Salida gráfica	Carácter	Empresa y comentarios
VISUAL MODFLOW		Privado	<p>THE HYDROGEOLOGIC GROUP. Modelo tridimensional en diferencias finitas para la simulación del flujo de aguas subterráneas.</p> <ul style="list-style-type: none"> – El más extendido en empresas públicas y privadas (alta versatilidad). – Permite la simulación de formaciones geológicas libres, confinadas y semi-confinadas. – Calcula las variaciones del flujo subterráneo en distintos escenarios (instalación de pozos, zonas de recarga, inyección de pozos, etc.). <p>http://www.ground-water-models.com/html/waterloo-training.html</p>
SEEP 2D		Público	<p>US ARMY CORPS. Modelo bidimensional en elementos finitos para la simulación del flujo subterráneo y distribución de redes de filtración.</p> <ul style="list-style-type: none"> – Muy efectivo para simular el flujo subterráneo en áreas con estructuras y elementos artificiales (presas, pozos, tablestacados, etc.). – Simula acuíferos libres, semi-confinados y confinados. – Calcula el valor de la permeabilidad en cada nodo. <p>http://www.ground-water-models.com/html/waterloo-training.html</p>
MT3DMS		Privado	<p>THE HYDROGEOLOGIC GROUP. Modelo tridimensional en diferencias finitas para la simulación de migración de contaminantes en aguas subterráneas (fenómenos de advección, adsorción, dispersión y reacciones químicas y biológicas de los contaminantes).</p> <ul style="list-style-type: none"> – Simulación en régimen permanente y transitorio. – Introduce un desarrollo matemático para la resolución de fenómenos de transporte por advección (a third order total variation diminishing (TVD), reduciendo la dispersión de los valores obtenidos en nodos próximos. <p>http://gms.watermodeling.org/html/mt3dms.html</p>

Modelo	Salida gráfica	Carácter	Empresa y comentarios
BIOSCREEN		Público	<p>US AIR FORCE. Modelo tridimensional en diferencias finitas que simula la biodegradación natural de suelos contaminados por hidrocarburos.</p> <ul style="list-style-type: none"> — Simula el avance de una potencial pluma contaminante — Simula la persistencia de la pluma contaminante en el medio hasta que los procesos naturales de biodegradación consiguieran disiparla. — El modelo pierde eficacia en zonas próximas a pozos de extracción de agua que modifiquen considerablemente el nivel freático y en zonas próximas a áreas afectadas por flujos verticales. <p>http://www.bioscreen.com/</p>
BIOPLUME		Público	<p>EPA. Modelo bidimensional en elementos finitos para la simulación de fenómenos de biodegradación de contaminantes orgánicos en aguas subterráneas.</p> <ul style="list-style-type: none"> — Simula procesos de biodegradación en condiciones aerobias y anaerobias, y su interacción con otros procesos: advección, dispersión, adsorción e intercambio iónico. — Para la simulación emplea los siguientes elementos: oxígeno, nitratos, hierro (III), sulfatos y dióxido de carbono. <p>http://www.epa.gov/ada/csmos/models/bioplume3.html</p>
HSSM		Público	<p>EPA. Modelo para la simulación de la contaminación inducida por hidrocarburos.</p> <ul style="list-style-type: none"> — Simula el transporte de fases líquidas ligeras no acuosas (LNAPL), como los hidrocarburos, en el subsuelo. — Incluye dos módulos separados: <ul style="list-style-type: none"> — El flujo de LNAPL a través de la zona vadosa y la franja capilar. — El transporte de constituyentes químicos de LNAPL en la capa freática. <p>http://www.scisoftware.com/products/hssm_model_details/hssm_model_details.html</p>
AIRFLOW/ SVE		Privado	<p>WATERLOO HYDROGEOLOGIC. Modelo tridimensional en diferencias finitas para la simulación del transporte de compuestos gaseosos (vapores) en suelos anisótropos y en la franja no saturada.</p> <ul style="list-style-type: none"> — Simula la extracción de vapores en suelos contaminados por compuestos volátiles a través de pozos y/o piezómetros. <p>http://www.scisoftware.com/products/airflowsve_overview/airflowsve_overview.html</p>

