



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

---

**FACULTAD DE INGENIERÍA**

**Riesgos químicos en la industria  
y la importancia del uso de  
softwares de simulación**

**TESIS**

Que para obtener el título de

**Ingeniero Civil**

**P R E S E N T A**

Jorge Aguilar Tinoco

**DIRECTOR DE TESIS**

Dr. Luis Antonio García Villanueva



Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2026



**PROTESTA UNIVERSITARIA DE INTEGRIDAD Y  
HONESTIDAD ACADÉMICA Y PROFESIONAL  
(Titulación con trabajo escrito)**



De conformidad con lo dispuesto en los artículos 87, fracción V, del Estatuto General, 68, primer párrafo, del Reglamento General de Estudios Universitarios y 26, fracción I, y 35 del Reglamento General de Exámenes, me comprometo en todo tiempo a honrar a la institución y a cumplir con los principios establecidos en el Código de Ética de la Universidad Nacional Autónoma de México, especialmente con los de integridad y honestidad académica.

De acuerdo con lo anterior, manifiesto que el trabajo escrito titulado RIESGOS QUIMICOS EN LA INDUSTRIA Y LA IMPORTANCIA DEL USO DE SOFTWARES DE SIMULACION que presenté para obtener el título de INGENIERO CIVIL es original, de mi autoría y lo realicé con el rigor metodológico exigido por mi Entidad Académica, citando las fuentes de ideas, textos, imágenes, gráficos u otro tipo de obras empleadas para su desarrollo.

En consecuencia, acepto que la falta de cumplimiento de las disposiciones reglamentarias y normativas de la Universidad, en particular las ya referidas en el Código de Ética, llevará a la nulidad de los actos de carácter académico administrativo del proceso de titulación.

---

**JORGE AGUILAR TINOCO**  
Número de cuenta: 421060959

## Agradecimientos

A mis hermanos, por su apoyo incondicional a lo largo de todo este camino. A mi madre, Maricarmen, quien ha sido el motor fundamental de este logro y de mi vida entera; todo lo que soy te lo debo a ti. Eres la persona más especial en mi vida.

En memoria de mi querido Chonis, el perro más fiel que pude desear. Me acompañó incondicionalmente en las noches de desvelo, en las alegrías y en los retos, sin dejarme solo un instante. Aunque hoy no esté físicamente para presenciar este logro, su compañía durante el proceso fue vital y sé que desde el cielo estará corriendo de felicidad celebrando conmigo este momento.

A Vania, por brindarme su amor, su espacio y sus sonrisas. Gracias por iluminar los días en que me faltaba la energía y por ser ese apoyo indispensable que necesitaba.

A mis amigos y compañeros de la Facultad de Ingeniería, por las incontables anécdotas que hicieron de esta etapa universitaria una experiencia inolvidable. Especialmente a Emiliano, Emilio, Dylan, Diego, Pedro y Francisco, por sumar tanto a mi vida, mucho más de lo que podría devolverles.

Finalmente, deseo expresar mi agradecimiento al Programa de Apoyo a Proyectos para Innovar y Mejorar la Educación (PAPIME), proyecto PE100125, por el apoyo otorgado para la realización de este trabajo.

# ÍNDICE

ÍNDICE DE FIGURAS .....	3
ÍNDICE DE TABLAS .....	5
CAPÍTULO 1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA. ....	6
JUSTIFICACIÓN.....	6
Objetivo. ....	8
Objetivos específicos. ....	8
CAPÍTULO 2. ESTADO DEL ARTE .....	9
CAPÍTULO 3. PROGRAMAS DE CÓMPUTO PARA ANÁLISIS DE RIESGOS QUÍMICOS .....	11
3.1 SOFTWARE DE ANÁLISIS DE RIESGOS EN PROCESOS (POR SUS SIGLAS EN INGLÉS PHAST™) .....	11
3.2 ÁREAS DE LOCALIZACIÓN DE ATMÓSFERAS PELIGROSAS (POR SUS SIGLAS EN INGLÉS ALOHA™) ....	16
3.3 ASPEN PLUS™.....	20
3.4 ASPEN HYSYS™.....	25
3.5 DWSIM™ .....	29
3.6 COMSOL MULTIPHYSICS™ .....	35
3.8 ECOLEGO .....	44
3.9 SIMULADOR DE PROPAGACIÓN Y ACELERACIÓN DE FLAMA (POR SUS SIGLAS EN INGLÉS FLACS™). 49	
CAPÍTULO 4. RESULTADOS COMPARATIVOS DE LOS SOFTWARES.....	60
4.1 Examinación de los softwares de análisis de riesgos químicos.....	60
4.11 Softwares orientados al análisis de consecuencias y respuesta a emergencias .....	60
4.12 Simuladores de procesos químicos aplicados a la prevención de riesgos .....	61
4.13 Softwares de simulación multifísica .....	70
4.14 Softwares para análisis probabilístico y evaluación de incertidumbre .....	70
4.15 Softwares especializados en simulación de explosiones y dispersión de gases .....	78
4.2 Comparación .....	85
CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES. ....	90
BIBLIOHEMEROGRAFÍA .....	93

## ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA 3.1. LOGO DE PHAST™. FUENTE: TORRENS, 2024.....	11
FIGURA 3.2. COMPARACIÓN DE UN FUEGO A CHORRO “JET FIRE” CAPTADO EN VÍDEO Y SIMULADO POR PHAST™. FUENTE: DNV.....	11
FIGURA 3.3. DISPERSIÓN DE HIDROGENO SIMULADA POR PHAST™. FUENTE: TORRENS, 2024.....	12
FIGURA 3.4. DISPERSIÓN DE GAS SIMULADA POR PHAST™. FUENTE: TORRENS, 2024.....	12
FIGURA 3.5. “POOL FIRE” O DARDO DE FUEGO. FUENTE: SALAZAR, 2022.....	13
FIGURA 3.6. “JET FIRE”, FUEGO A CHORRO O DARDO DE FUEGO. FUENTE: SALAZAR, 2022.....	14
FIGURA 3.7. “FIREBALL” O BOLA DE FUEGO. FUENTE: SALAZAR, 2022.....	14
FIGURA 3.8. INTERFAZ DE OPCIONES DE INCENDIO DE PHAST™. FUENTE: DNV.....	14
FIGURA 3.9. SOFTWARE MARPLOT™ DE OBJETOS EN MAPAS CON ALOHA™. FUENTE: EPA.....	17
FIGURA 3.10. REPRESENTACIÓN DE UNA ZONA DE AMENAZA TÓXICA DE ALOHA™. FUENTE: EPA.....	18
FIGURA 3.11. LOGO DE ASPEN PLUS™. FUENTE: UNIVERSIDAD DE LOS ANDES.....	20
FIGURA 3.12. MODELADO RIGUROSO DE PROCESOS INTEGRADOS DE ASPEN PLUS™. FUENTE: ASPENTECH.....	22
FIGURA 3.13. VISUALIZACIÓN HIDRÁULICA POR DESTILACIÓN DE ASPEN PLUS™. FUENTE: ASPENTECH.....	23
FIGURA 3.14. RESULTADOS DE ALGUNAS EMPRESAS DE LA GESTIÓN ENERGÉTICA DE ASPEN PLUS™. FUENTE: ASPENTECH.....	24
FIGURA 3.15. RESULTADOS DE ALGUNAS EMPRESAS DE LA GESTIÓN ENERGÉTICA DE ASPEN PLUS™. FUENTE: ASPENTECH.....	24
FIGURA 3.16. DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROCESO DE OXIDACIÓN HÚMEDA CON AIRE EN ASPEN PLUS™. FUENTE: TAGER ET AL, 2023.....	25
FIGURA 3.17. LOGO DE ASPEN HYSYS™. FUENTE: GOOGLE PLAY.....	26
FIGURA 3.18. DIAGRAMA DE CORRIENTE DE VAPOR Y AGUA DE ASPEN HYSYS™. FUENTE: ASPENTECH.....	27
FIGURA 3.19. SIMULACIÓN DE FLUIDOS DE ASPEN HYSYS™. FUENTE: KINGSLEY EKE, 2015.....	28
FIGURA 3.20. LOGO DE DWSIM™. FUENTE: DWSIM.....	29
FIGURA 3.21. FUNCIONES DE DWSIM™. FUENTE: DWSIM.....	29
FIGURA 3.22. DIAGRAMA DE PROCESAMIENTO DE GAS NATURAL DE DWSIM™. FUENTE: DWSIM.....	33
FIGURA 3.23. DIAGRAMA DE PRODUCCIÓN DE BIODIÉSEL DE DWSIM™. FUENTE: DWSIM.....	33
FIGURA 3.24. SÍNTESIS DE METANOL DE DWSIM™. FUENTE: DWSIM.....	34
FIGURA 3.25. DESTILACIÓN DE PETRÓLEO DE DWSIM™. FUENTE: DWSIM.....	34
FIGURA 3.26. LOGO DE COMSOL MULTIPHYSICS™. FUENTE: COMSOL.....	35
FIGURA 3.27. GRÁFICA GENERADA DE LA FRACCIÓN MOLECULAR EN UNA REACCIÓN CON COMSOL MULTIPHYSICS™. FUENTE: COMSOL.....	36
FIGURA 3.28. GRÁFICA GENERADA DE PH CON COMSOL MULTIPHYSICS™. FUENTE: COMSOL.....	37
FIGURA 3.29. LA INGENIERÍA DE LAS REACCIÓN QUÍMICA E INTERFACES CFD DE COMSOL MULTIPHYSICS™. FUENTE: COMSOL.....	38
FIGURA 3.30. BARRA DE FUNCIONES DE REACCIONES QUÍMICAS DE COMSOL MULTIPHYSICS™. FUENTE: COMSOL.....	38
FIGURA 3.31. REACCIONES QUÍMICAS DE COMSOL MULTIPHYSICS™. FUENTE: COMSOL.....	39
FIGURA 3.32. RÉGIMEN DE FLUJO MOLECULAR LIBRE DE COMSOL MULTIPHYSICS™. FUENTE: COMSOL.....	39
FIGURA 3.33. SIMULACIÓN DE CORROSIÓN ATMOSFÉRICA DE COMSOL MULTIPHYSICS™. FUENTE: COMSOL. .....	40
FIGURA 3.34. SIMULACIÓN DE CORRIENTES AGUAS RESIDUALES CON METALES DE COMSOL MULTIPHYSICS™. FUENTE: COMSOL.....	41

FIGURA 3.35. SIMULACIÓN DE LA DISTRIBUCIÓN DE CORRIENTE TERCIARIA DE COMSOL MULTIPHYSICS™. FUENTE: COMSOL.....	41
FIGURA 3.36. SIMULACIÓN EN TODA LA CADENA DE VALOR DEL HIDRÓGENO DE COMSOL MULTIPHYSICS™. FUENTE: COMSOL.....	42
FIGURA 3.37. ANTECEDENTES DE LA INDUSTRIA INTERNACIONAL CON COMSOL MULTIPHYSICS™. FUENTE: COMSOL.....	43
FIGURA 3.38. LOGO DE ECOLEGO™. FUENTE: G2, 2018.....	44
FIGURA 3.39. INTERFAZ DE ECOLEGO™. FUENTE: ÁVILA, 2013.....	45
FIGURA 3.40. HERRAMIENTAS DE CÁLCULO DE ECOLEGO™. FUENTE: ÁVILA, 2013.....	45
FIGURA 3.41. MODELOS JERÁRQUICOS DE ECOLEGO™. FUENTE: ÁVILA, 2013.....	46
FIGURA 3.42. SIMULACIONES DE ECOLEGO™. FUENTE: ÁVILA, 2013.....	48
FIGURA 3.43. GRÁFICAS DE ECOLEGO™. FUENTE: ÁVILA, 2013.....	49
FIGURA 3.44. LOGO DE FLACST™. FUENTE: GEXCON, 2025.....	50
FIGURA 3.45. CATÁLOGO DE ESCENARIOS Y HERRAMIENTAS DE EXPLOSIONES DE FLACST™. FUENTE: GEXCON, 2022.....	51
FIGURA 3.46. SIMULACIÓN 3D DE FLACST™. FUENTE: GEXCON, 2022.....	52
FIGURA 3.47. SIMULACIÓN 3D DE UNA INUNDACIÓN DE FLACST™. FUENTE: GEXCON, 2022.....	53
FIGURA 3.48. SIMULACIÓN 3D DE UNA FUGA DE GAS DE FLACST™. FUENTE: GEXCON, 2022.....	54
FIGURA 3.49. SIMULACIÓN DE UNA FUGA DE GAS CON GRÁFICA DE FLACST™. FUENTE: GEXCON, 2022.....	55
FIGURA 3.50. SIMULACIÓN DE UN INCENDIO A CHORRO (JET FIRE) DE FLACST™. FUENTE: GEXCON, 2019.....	56
FIGURA 3.51. SIMULACIÓN DE UNA DEFLAGRACIÓN DE HIDRÓGENO DE FLACST™. FUENTE: GEXCON, 2019.....	57
FIGURA 3.52. SIMULACIÓN DE UNA EXPLOSIÓN DE POLVO DE FLACST™. FUENTE: GEXCON, 2017.....	58
FIGURA 3.53. INTERFAZ DE UNA EXPLOSIÓN DE FLACST™. FUENTE: GEXCON, 2022.....	58
FIGURA 3.54. SIMULACIÓN DE UNA EXPLOSIÓN DE FLACST™. FUENTE: GEXCON, 2019.....	59
FIGURA 4.1. MODELO DE COMPRESIÓN DE REFUERZO EN DWSIM™. FUENTE: TANGSRIWONG ET AL, 2020.....	62
FIGURA 4.2. MODELO DE COMPRESIÓN DE REFUERZO EN ASPEN PLUS™. FUENTE: TANGSRIWONG ET AL, 2020. .....	63
FIGURA 4.3. EQUIPOS DE PROCESO DE COMPRESIÓN Y EXPORTACIÓN DE GAS DE VENTA EN DWSIM™. FUENTE: TANGSRIWONG ET AL, 2020.....	63
FIGURA 4.4. EQUIPOS DE PROCESO DE COMPRESIÓN Y EXPORTACIÓN DE GAS DE VENTA EN ASPEN PLUS™. FUENTE: TANGSRIWONG ET AL, 2020.....	63
FIGURA 4.5. COMPARACIÓN DE LA TEMPERATURA DE CADA ESTADO PARA (A) COMPRESIÓN DEL AMPLIFICADOR (B) COMPRESIÓN DEL GAS DE VENTA. FUENTE: TANGSRIWONG ET AL, 2020.....	64
FIGURA 4.6. COMPARACIÓN DE LA PRESIÓN DE CADA ESTADO PARA (A) COMPRESIÓN DEL AMPLIFICADOR (B) COMPRESIÓN DEL GAS DE VENTA. FUENTE: TANGSRIWONG ET AL, 2020.....	65
FIGURA 4.7. COMPARACIÓN DEL CAUDAL MÁSIKO DE CADA ESTADO PARA (A) COMPRESIÓN DE REFUERZO (B) COMPRESIÓN DE GAS DE VENTA. FUENTE: TANGSRIWONG ET AL, 2020.....	65
FIGURA 4.8. DIAGRAMA DE FLUJO DEL CASO 1 EN DWSIM™. FUENTE: ULLAH ET AL, 2022.....	66
FIGURA 4.9. DIAGRAMA DE FLUJO DEL CASO 1 EN ASPEN HYSYS™. FUENTE: ULLAH ET AL, 2022.....	66
FIGURA 4.10. DIAGRAMA DE FLUJO DEL CASO 2 EN DWSIM™. FUENTE: ULLAH ET AL, 2022.....	67
FIGURA 4.11. DIAGRAMA DE FLUJO DEL CASO 2 EN ASPEN HYSYS™. FUENTE: ULLAH ET AL, 2022.....	67
FIGURA 4.12. DIAGRAMA DE FLUJO DEL CASO 3 EN DWSIM™. FUENTE: ULLAH ET AL, 2022.....	68
FIGURA 4.13. DIAGRAMA DE FLUJO DEL CASO 3 EN ASPEN HYSYS™. FUENTE: ULLAH ET AL, 2022.....	68
FIGURA 4.14. GRÁFICAS COMPARATIVAS DE RESULTADOS. FUENTE: ULLAH ET AL, 2022.....	69
FIGURA 4.15. PROYECCIÓN TEMPORAL DE EXPOSICIÓN DE DOSIS A UN INFANTE. FUENTE: DUDU ET AL, 2025.....	71

FIGURA 4.16. PROYECCIÓN TEMPORAL DE EXPOSICIÓN DE DOSIS A UN ADULTO. FUENTE: DUDU ET AL, 2025.....	72
FIGURA 4.17. CONCENTRACIÓN LOG10 DE RADIONÚCLIDOS EN EL COMPARTIMENTO DE AIRE DE LA MINA B A LO LARGO DE 100 AÑOS. FUENTE: DUDU ET AL, 2025. ....	72
FIGURA 4.18. RADIONÚCLIDOS Y SU VIDA MEDIA UTILIZADOS COMO PARÁMETROS DEL MODELO. FUENTE: DUDU ET AL, 2025. ....	73
FIGURA 4.19. RADIONÚCLIDOS Y SU VIDA MEDIA UTILIZADOS COMO PARÁMETROS DEL MODELO. FUENTE: KRISANANGKURA ET AL., 2013. ....	74
FIGURA 4.20. PREDICCIÓN DE LAS ACTIVIDADES DE RADIONUCLEIDOS EN EL PERFIL DEL SUELO EN FUNCIÓN DEL TIEMPO PARA LA LOCALIDAD DE IITATE: (A) SUELO SUPERFICIAL Y (B) SUELO PROFUNDO. FUENTE: KRISANANGKURA ET AL., 2013. ....	75
FIGURA 4.21. EVOLUCIÓN TEMPORAL DE LA CONCENTRACIÓN DE RADIONUCLEIDOS EN DIVERSOS CULTIVOS LOCALES A LO LARGO DE 100 AÑOS: (A) INICIAL, (B) 15 DÍAS, (C) 1 AÑO, (D) 10 AÑOS, (E) 50 AÑOS Y (F) 100 AÑOS. FUENTE: KRISANANGKURA ET AL., 2013. ....	76
FIGURA 4.22. EVOLUCIÓN DE LA CONTAMINACIÓN POR RADIONUCLEIDOS EN LECHE Y CARNE ANIMAL A LO LARGO DE UN SIGLO. FUENTE: KRISANANGKURA ET AL., 2013.....	77
FIGURA 4.23. FACTORES DE CONVERSIÓN DE DOSIS CALCULADOS PARA VARIOS RADIONUCLEIDOS Y ESCENARIOS. FUENTE: POHJOLA ET AL., 2019.....	78
FIGURA 4.24. TRAYECTORIA DE LA COLUMNA DE ARRIBA A ABAJO – LIBERACIÓN HORIZONTAL DE 6” DE DIÁMETRO. FUENTE: QUILLATRE, 2017. ....	80
FIGURA 4.25. DISMINUCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN EN LA COLUMNA DE GAS – LIBERACIÓN HORIZONTAL DE 6” DE DIÁMETRO. FUENTE: QUILLATRE, 2017.....	80
FIGURA 4.26. TRAYECTORIA DE LA COLUMNA PROPORCIONADA DE ARRIBA A ABAJO – DIÁMETRO VERTICAL DE 18”. FUENTE: QUILLATRE, 2017. ....	81
FIGURA 4.27. DISMINUCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN EN LA COLUMNA DE GAS – LIBERACIÓN VERTICAL DE 18” DE DIÁMETRO. FUENTE: QUILLATRE, 2017.....	81
FIGURA 4.28. GRÁFICA DE LA DISPERSIÓN DE AMONIACO DEL ENSAYO DE PHAST™ EN 2D. FUENTE: GUDDAL, 2025.....	83
FIGURA 4.29. GRÁFICA DE LA DISPERSIÓN DE AMONIACO DEL ENSAYO DE FLACST™ EN 2D. FUENTE: GUDDAL, 2025.....	83
FIGURA 4.30. VISUALIZACIÓN 3D QUE COMPARA LA DISPERSIÓN DE AMONIACO CON EL TERRENO PLANO DE LA PARTE SUPERIOR Y LA TOPOGRAFÍA DE BERGEN EN FLACST™. FUENTE: GUDDAL, 2025.....	84
FIGURA 4.31. GRÁFICO 3D DE LOS EFECTOS TOPOGRÁFICOS SOBRE LA DISPERSIÓN DE AMONIACO DESDE UNA PERSPECTIVA LATERAL EN FLACST™. FUENTE: GUDDAL, 2025. ....	85

## ÍNDICE DE TABLAS

TABLA 3.1. TABLA COMPARATIVA DE LOS TIPOS DE INCENDIOS QUE ANALIZA PHAST™.....	13
TABLA 4.1. TABLA COMPARATIVA 1 DE LOS SOFTWARES. ....	86
TABLA 4.2. TABLA COMPARATIVA 2 DE LOS SOFTWARES. ....	87
TABLA 4.3. TABLA COMPARATIVA 3 DE LOS SOFTWARES. ....	88
TABLA 4.4. TABLA COMPARATIVA 4 DE LOS SOFTWARES. ....	89

# CAPÍTULO 1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.

## JUSTIFICACIÓN

Los peligros químicos, inherentes a numerosas actividades industriales, representan el potencial de causar daño a la salud humana, el medio ambiente y la integridad de las instalaciones. Estos peligros abarcan cualquier sustancia química con la capacidad de causar daños, ya sea en estado gaseoso, líquido o sólido. Las consecuencias para la salud pueden ser diversas, desde intoxicaciones agudas y enfermedades crónicas hasta efectos a largo plazo como cáncer y defectos congénitos. Adicionalmente, los impactos ambientales pueden ser significativos, incluyendo la contaminación de ecosistemas y la alteración de su equilibrio (Contreras, 2023).

Por otro lado, los riesgos químicos se refieren a la probabilidad de sufrir daños debido a la exposición a un peligro químico. Los riesgos químicos se clasifican según sus propiedades intrínsecas, tales como inflamabilidad, explosividad, reactividad, corrosividad y toxicidad. Es crucial distinguir entre peligro y riesgo: mientras que el peligro es la propiedad inherente de una sustancia para causar daño, el riesgo se refiere a la probabilidad de que ese daño ocurra bajo condiciones específicas de exposición. La evaluación de riesgos, por lo tanto, busca determinar la probabilidad y severidad de los daños asociados a la exposición a sustancias químicas (Contreras, 2023).

Una gestión eficaz de riesgos químicos implica un proceso cíclico que comprende la identificación de los peligros y evaluación de los riesgos, la implementación de medidas de control para minimizar la exposición, y la supervisión y revisión continua de la eficacia de estas medidas. En este contexto, el uso de softwares y modelaciones para simular incidentes relacionados con riesgos químicos, como fugas, explosiones y derrames, se ha convertido en una herramienta esencial. (Contreras, 2023).

A lo largo de la historia, los riesgos químicos se han mostrado en importantes accidentes químicos desde 1921 en la explosión de Oppau, Alemania involucrando nitrato de amonio (Carvajal, 2018), hasta el accidente más reciente en 2023 del derrame químico en Ohio, Estados Unidos la cual fue causada por el descarrilamiento de un tren que transportaba material químico peligroso, entre ellos cloruro de vinilo, líquidos combustibles, acrilato de butilo y residuos de benceno. (Debusmann, 2023).

Del mismo modo en México se registró el primer accidente en 1984 en Tlalnepantla de Baz, Estado de México mediante una serie de explosiones dada por una fuga en una tubería que transportaba gas LP, hasta el incidente más reciente en 2019 en Tlahuelilpan, Hidalgo que consistió en una explosión e incendio debido a una toma clandestina de gasolina (Proyecto de Integración y Desarrollo de Mesoamérica, s.f.).

La necesidad de utilizar softwares y modelaciones para simular incidentes químicos radica en su capacidad para proporcionar información crítica. De acuerdo con la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo (UAEH), dicha información puede ser útil en diversas áreas:

1. **Prevención y reducción de riesgos:** Las simulaciones permiten predecir el comportamiento de sustancias peligrosas ante escenarios de fugas o derrames, facilitando la identificación de puntos críticos y el diseño de estrategias preventivas. Se pueden modelar escenarios como la dispersión de gases tóxicos o la extensión de derrames, lo que permite anticipar y minimizar la exposición y los daños potenciales.
2. **Planificación y preparación ante emergencias:** Estas herramientas son fundamentales para la planificación de simulacros realistas y la preparación de los trabajadores ante emergencias. Permiten determinar las estrategias óptimas de contención y evacuación en tiempo real, maximizando la eficiencia de la respuesta.
3. **Evaluación de impacto ambiental:** Las fugas y derrames pueden tener consecuencias devastadoras para el medio ambiente. La simulación de estos eventos ayuda a comprender el alcance potencial del daño, lo que permite tomar decisiones informadas sobre las medidas de mitigación y remediación necesarias, como barreras de contención, zonas de evacuación y métodos de limpieza.
4. **Optimización de recursos de seguridad:** Los softwares permiten identificar las zonas de mayor riesgo dentro de una instalación, optimizando la asignación de recursos. Se pueden priorizar inversiones en equipos de detección y control, capacitación del personal y sistemas de alarma, maximizando la seguridad sin incurrir en gastos innecesarios.
5. **Cumplimiento normativo:** Numerosas regulaciones nacionales e internacionales exigen que las instalaciones industriales realicen análisis de riesgos y demuestren su capacidad para gestionar incidentes químicos. Los softwares y las simulaciones son herramientas valiosas para cumplir con estos requisitos, facilitando evaluaciones detalladas y la documentación de los esfuerzos en materia de seguridad.
6. **Diseño y mejora continua de instalaciones:** La simulación de diferentes escenarios de emergencia permite a ingenieros y diseñadores evaluar y mejorar el diseño de las instalaciones. Se pueden optimizar aspectos como la ubicación de válvulas de seguridad, sistemas de ventilación, sistemas de contención y rutas de escape.
7. **Reducción de costos y tiempo:** Las simulaciones virtuales permiten realizar pruebas y análisis sin interrumpir las operaciones de la planta, lo que se traduce en una reducción significativa de costos y tiempos asociados a pruebas físicas. Además, se minimiza el riesgo de accidentes durante las pruebas.
8. **Toma de decisiones informadas:** Los resultados de las simulaciones proporcionan a los responsables de la toma de decisiones información precisa y relevante para actuar de manera oportuna y adecuada ante situaciones de emergencia. Se pueden explorar diferentes escenarios y evaluar diversas alternativas para seleccionar la mejor estrategia.

### **Tipos de accidentes químicos más comunes**

Con base al Centro Nacional de Prevención de Desastres (CENAPRED, 2006), algunos tipos son más frecuentes y representan riesgos significativos:

1. **Fugas de gases tóxicos o inflamables:** Las fugas de gases peligrosos, como amoníaco, cloro, dióxido de azufre, metano o propano, son comunes en instalaciones industriales. Pueden ser causadas por fallas en sistemas de contención y resultar en intoxicaciones, incendios o explosiones.
2. **Derrames de sustancias químicas en estado líquido:** Derrames de ácidos, solventes o productos petroquímicos son frecuentes, especialmente durante el manejo y almacenamiento de estas sustancias. Pueden contaminar el suelo, el agua y el aire, representando un peligro directo para la salud y el medio ambiente.
3. **Explosiones:** Las explosiones, particularmente en instalaciones que manejan productos químicos inflamables o reactivos, son uno de los accidentes más graves. Pueden ser desencadenadas por reacciones químicas inesperadas, acumulación de gases inflamables o fallas en la gestión de la presión.
4. **Incendios químicos:** Los incendios químicos, producto de la combustión de sustancias inflamables o reactivas, generan llamas y calor extremo. Pueden ser el resultado de fugas o la liberación de vapores inflamables y son particularmente peligrosos debido a la propagación y la dificultad para su control.
5. **Reacciones químicas incontroladas:** Reacciones químicas mal gestionadas, ya sea por errores en el proceso o fallas en los equipos, pueden generar explosiones, incendios o la liberación de gases tóxicos.

Con base en lo anterior, se resalta la importante la investigación y el conocimiento de paqueterías y softwares capaces de simular y prevenir accidentes químicos dentro de la formación del alumnado, puesto que de esta forma terminarán sus estudios de licenciatura con conocimientos previos al campo laboral para aportar al área química en la que se lleguen a desarrollar, y reducir dichos accidentes.

### Objetivo.

Examinar los diferentes programas de cómputo en el uso de análisis de riesgos químicos para la actualización del estado del arte mediante la comparación de sus diferentes limitaciones y alcances.

### Objetivos específicos.

Investigar los diferentes programas de cómputo para el análisis de riesgos químicos mediante una revisión bibliográfica de los últimos 10 años.

Sistematizar la información recabada para su posterior análisis individual considerando sus diferentes áreas de aplicación.

Clasificar los diferentes programas de cómputo para la identificación de su lenguaje y su metodología mediante la categorización de sus áreas de aplicación.

## CAPÍTULO 2. ESTADO DEL ARTE

En el contexto industrial contemporáneo, los riesgos químicos representan una de las amenazas más críticas tanto para la salud humana como para el medio ambiente y la infraestructura operativa. Estos riesgos surgen a partir del uso, almacenamiento o transporte de sustancias químicas peligrosas, las cuales pueden encontrarse en estado gaseoso, líquido o sólido. Los peligros asociados a estos compuestos incluyen intoxicaciones agudas, enfermedades crónicas, alteraciones genéticas y daños severos al entorno natural, incluyendo la contaminación de cuerpos de agua, suelo y aire (Contreras, 2023). La gestión adecuada de estos riesgos requiere una comprensión clara de la diferencia entre "peligro", como la propiedad inherente de una sustancia para causar daño, y "riesgo", entendido como la probabilidad de que ese daño ocurra bajo ciertas condiciones de exposición (Contreras, 2023).

Históricamente, la industria ha sido testigo de numerosos accidentes relacionados con sustancias químicas, como la explosión de Oppau en 1921 y la tragedia de la refinería de British Petroleum en Texas en 2005 (Carvajal, 2018). En México, eventos como las explosiones en Tlalnepantla en 1984 y la catástrofe de Tlahuelilpan en 2019 han evidenciado la urgencia de contar con herramientas tecnológicas capaces de anticipar y mitigar estos incidentes (Proyecto de Integración y Desarrollo de Mesoamérica, s.f.). Ante este panorama, el uso de software de simulación ha emergido como una estrategia esencial dentro del análisis de riesgos químicos.

La simulación computacional permite modelar, con un alto grado de precisión, escenarios de emergencia como fugas de gases tóxicos, derrames de líquidos peligrosos, explosiones o incendios químicos. Este tipo de herramientas resulta especialmente útil en etapas de prevención, ya que facilita la identificación de puntos críticos, la evaluación de la dispersión de sustancias y el diseño de planes de contención y evacuación (Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo [UAEH], s.f.). En este sentido, softwares como PHAST™ y ALOHA™ han sido ampliamente utilizadas para calcular el impacto potencial de eventos químicos. PHAST™, por ejemplo, destaca por su precisión en concentraciones bajas y condiciones meteorológicas estables, mientras que ALOHA™, si bien más accesible, presenta limitaciones en escenarios complejos (Ullah et al, 2022).

Por otro lado, simuladores de procesos químicos como ASPEN PLUS™ y HYSYS™ ofrecen capacidades avanzadas para diseñar y optimizar operaciones industriales. ASPEN PLUS™ es especialmente valorado por su robustez en análisis termodinámicos y balances de masa y energía, mientras que ASPEN HYSYS™ se orienta al modelado dinámico, permitiendo simular condiciones transitorias y sistemas de control. En contraste, DWSIM™, una alternativa de código abierto ha ganado terreno en contextos educativos y empresas emergentes debido a su accesibilidad y rendimiento comparable a software comercial, con diferencias en resultados inferiores al 5 % en estudios de simulación en estado estacionario (Tangsriwong et al., 2020).

Otro tipo de herramientas como COMSOL MULTIPHYSICS™ se emplean para modelar fenómenos multifísicos, permitiendo combinar reacciones químicas con transferencia de calor y dinámica de fluidos. Esto resulta particularmente útil en industrias farmacéuticas o de materiales avanzados, donde los procesos involucran múltiples disciplinas científicas. Asimismo, software como FLACS™, especializado en dinámica de fluidos computacional (CFD), se utiliza en la simulación de explosiones y dispersión de gases peligrosos, siendo aplicado incluso en la

reconstrucción de accidentes históricos. Un caso paradigmático es el desastre de Piper Alpha en 1988, cuya investigación oficial, el Informe Cullen, estableció nuevos estándares de seguridad offshore y destacó la importancia de modelar la dispersión de gases y las barreras de fuego (Cullen, 1990).

El análisis de los últimos diez años revela una tendencia hacia la incorporación de inteligencia artificial y técnicas de aprendizaje automático en la simulación de procesos químicos. Estas tecnologías permiten no solo modelar escenarios con mayor rapidez, sino también anticipar desviaciones en tiempo real y optimizar la respuesta ante emergencias (Gopaluni et al., 2020). De igual forma, se observa una creciente adopción de software que incluye modelación probabilística y análisis de incertidumbre, como ECOLEGO™ el cual es una herramienta fundamental en contextos regulatorios exigentes y con alta variabilidad de parámetros (Avila, 2013).

Comparativamente, cada software presenta fortalezas y limitaciones. Las soluciones comerciales como ASPEN PLUS™, ASPEN HYSYS™ o FLACS™ ofrecen un alto nivel de precisión y soporte técnico, pero su costo elevado y curva de aprendizaje restringen su uso a grandes industrias. Por el contrario, softwares como DWSIM™ o ALOHA™ democratizan el acceso a la simulación, siendo ideales para formación académica o análisis preliminares, aunque con ciertas limitaciones técnicas. Elegir la herramienta adecuada implica considerar variables como el tipo de sustancia analizada, el objetivo del estudio (diseño, respuesta, evaluación ambiental) y la disponibilidad de datos técnicos confiables.

En conclusión, el uso de software de simulación para el análisis de riesgos químicos en la industria no solo optimiza los procesos de seguridad y prevención, sino que también fortalece el cumplimiento normativo, reduce costos operativos y contribuye a la sostenibilidad ambiental. La formación de profesionales capacitados en estas tecnologías se convierte, por tanto, en una necesidad estratégica para mitigar los riesgos inherentes a la actividad industrial y avanzar hacia modelos de producción más seguros e inteligentes.

## CAPÍTULO 3. PROGRAMAS DE CÓMPUTO PARA ANÁLISIS DE RIESGOS QUÍMICOS

### 3.1 SOFTWARE DE ANÁLISIS DE RIESGOS EN PROCESOS (POR SUS SIGLAS EN INGLÉS PHAST™)

PHAST™ es una herramienta de software para el análisis de peligros de procesos desarrollada por DNV, considerada como la más completa para todas las etapas del diseño y operación en la industria de procesos. Permite examinar de forma integral desde la liberación inicial hasta la dispersión a larga distancia, modelando fenómenos como la propagación por charcos (pool spreading) y evaporación, así como efectos inflamables y tóxicos (DNV, 2025).

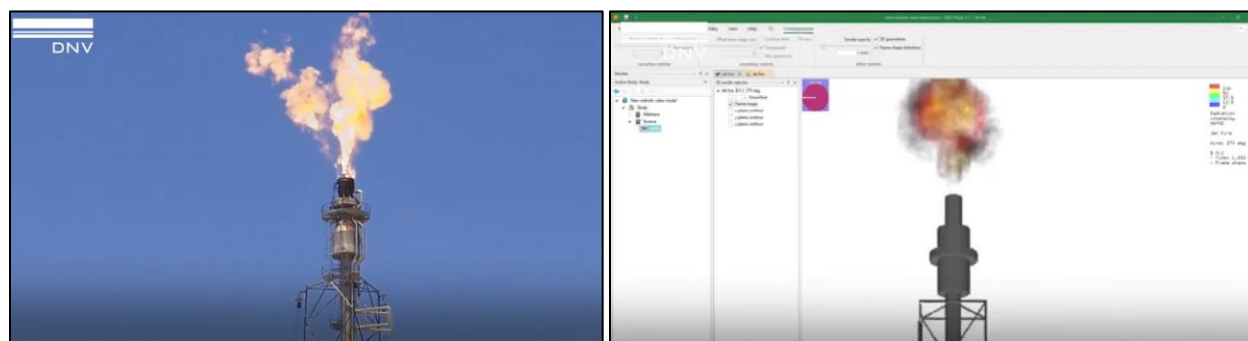
En la figura 3.1 es posible observar el logo del software PHAST™.



*Figura 3.1. Logo de PHAST™. Fuente: Torrens, 2024.*

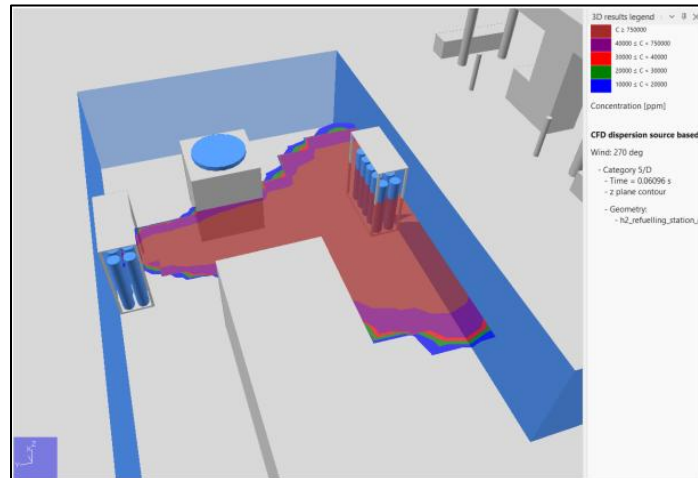
#### Principales capacidades

- Modelado de liberaciones: Simula escapes de líquidos, gases o vapores a distintas presiones y temperaturas (ver Figura 3.2).

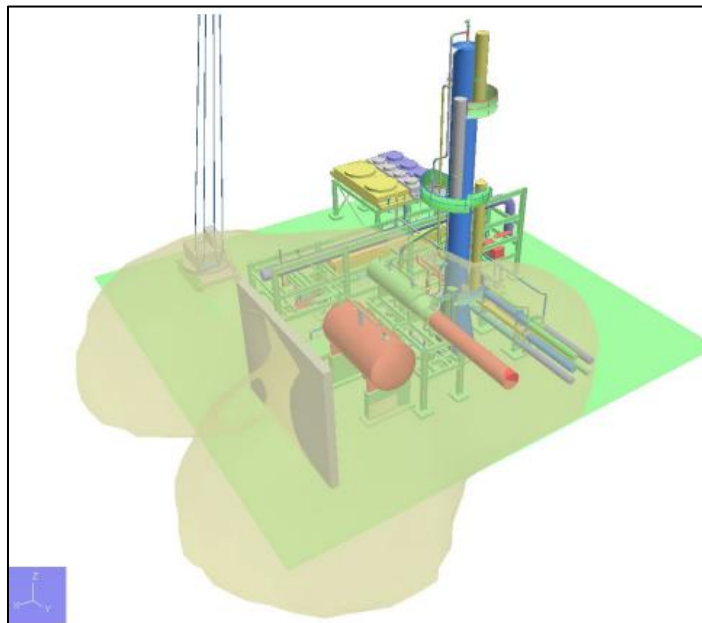


*Figura 3.2. Comparación de un fuego a chorro “Jet Fire” captado en vídeo y simulado por PHAST™. Fuente: DNV, 2025.*

- Dispersiones atmosféricas: Calcula la concentración de sustancias peligrosas a diferentes distancias, considerando viento, estabilidad atmosférica y topografía (ver Figura 3.3 y Figura 3.4).



**Figura 3.3. Dispersión de hidrogeno simulada por PHAST™. Fuente: Torrens, 2024.**



**Figura 3.4. Dispersión de gas simulada por PHAST™. Fuente: Torrens, 2024.**

- Incendios: Analiza tipos como pool fire, jet fire y fireball (la Tabla 3.1 presenta la descripción de cada uno), estimando radiación térmica y áreas afectadas. En la Figura 3.8 es posible apreciar la interfaz que proporciona PHAST™ para generar los tipos de incendios mencionados.

**Tabla 3.1. Tabla comparativa de los tipos de incendios que analiza PHAST™.**

<b>Pool Fire</b> <b>“Incendio en piscina o de charco”</b>	<b>Jet Fire</b> <b>“Fuego a chorro o dardo de fuego”</b>	<b>Fire Ball</b> <b>“Bola de fuego”</b>
<p>Un "Pool Fire" o incendio en piscina o de charco es un derrame de un líquido inflamable que forma un charco del líquido, por evaporación se generan gases y se produce el incendio (ver Figura 3.5).</p>	<p>Un "Jet Fire" es un incendio que se presenta por la fuga de vapores o gases inflamables a alta velocidad, en tanques de almacenamiento o tuberías que contienen gases bajo presión o comprimidos, produciéndose un chorro de gas que al alcanzar una fuente de ignición forma una flama hasta agotar el combustible. La descarga se presenta por un agujero o una válvula (ver Figura 3.6).</p>	<p>Un "Fire Ball" o bola de fuego se produce por la fuga instantánea y la ignición casi inmediata de una gran cantidad de masa evaporada de una sustancia inflamable que al liberarse al exterior arrastra partículas de líquido y entra en combustión. La "bola" inicialmente tiene una forma esferoidal y posteriormente adquiere una forma de hongo. La combustión es muy rápida, pero no genera ondas de presión significativas. La bola de fuego constituye un incendio "rápido", no una explosión. Normalmente está asociada al fenómeno de BLEVE cuando involucra un producto combustible (ver Figura 3.7).</p>

Fuente: Salazar, 2022.



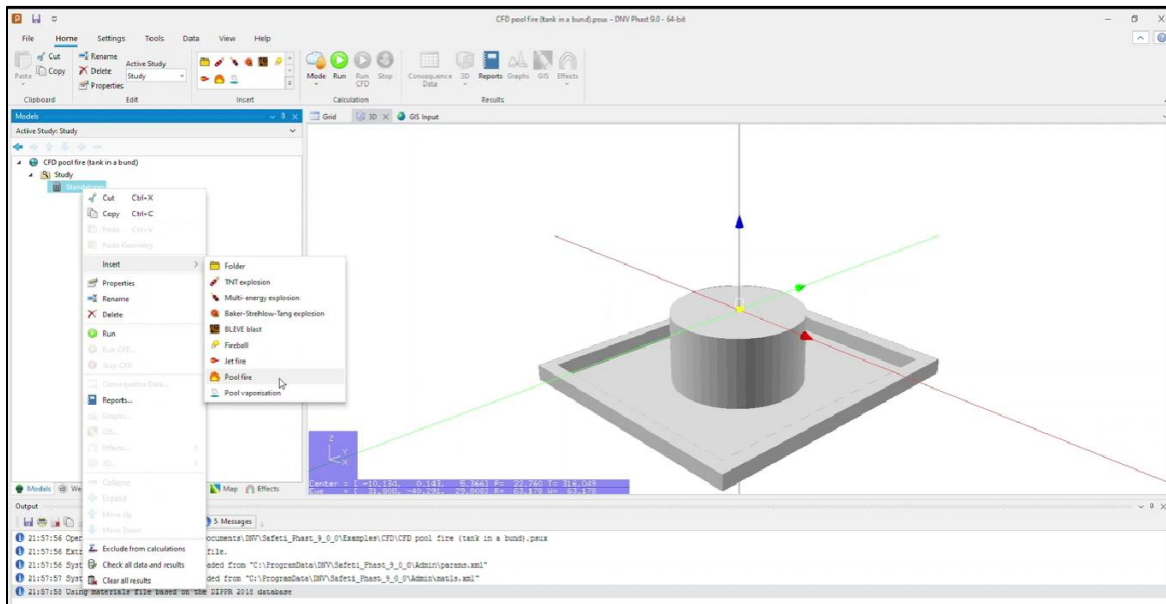
**Figura 3.5. “Pool Fire”, incendio en piscina o de charco. Fuente: Salazar, 2022.**



**Figura 3.6. “Jet Fire”, fuego a chorro o dardo de fuego. Fuente: Salazar, 2022.**



**Figura 3.7. “Fireball” o bola de fuego. Fuente: Salazar, 2022.**



**Figura 3.8. Interfaz de opciones de incendio de PHAST™. Fuente: DNV, 2025.**

- Explosiones: Estima sobrepresiones y zonas de daño en deflagraciones o detonaciones.
- Análisis tóxico: Predice niveles de exposición y riesgos para personas, basándose en valores IDLH, ERPG, AEGL u otros criterios.

De acuerdo con Arnaudov, 2024:

**Valores IDLH (por sus siglas en inglés):** Son valores "Inmediatamente Peligrosos para la Vida o la Salud", son concentraciones de sustancias químicas que representan un riesgo inmediato para la vida o la salud de un trabajador si se exponen a ellas sin la protección adecuada.

**Valores ERPG (por sus siglas en inglés):** Son "Guías para la Planificación de la Respuesta a Emergencias" son niveles de concentración de sustancias químicas que sirven como guía para la planificación de respuesta a emergencias, enfocándose en los posibles efectos en la salud humana.

**Valores AEGL (por sus siglas en inglés):** Son "Niveles de Referencia de Exposición Aguda" son niveles de concentración de sustancias químicas en el aire que se utilizan para evaluar los riesgos para la salud pública en situaciones de emergencia, como derrames o liberaciones accidentales.

### Metodología y módulos

- Source term models – Modelos de Términos Fuente: Determinan las características de la fuga (tasa de liberación, temperatura, fase de la sustancia).
- Dispersion models – Modelos de Dispersión: Usan ecuaciones tipo Gaussian o modelos avanzados para dispersión en el aire.
- Fire models – Modelos de Incendio: Calculan energía térmica y radios de impacto.
- Explosion models – Modelos de Explosión: Estiman sobrepresiones y radio letal.
- Risk integration – Integración de Riesgos: Combina probabilidad de ocurrencia con consecuencias para cuantificar el riesgo total.

PHAST™ se utiliza en una amplia variedad de aplicaciones del análisis de riesgos, tales como: análisis de dispersión y consecuencias, clasificación de áreas peligrosas, planificación de disposición de planta (site layout), análisis de incendios y edificaciones ocupadas (occupied building risk), planificación de respuesta a emergencias, organización de instalaciones, estudios HAZID, HAZOP, LOPA y análisis cuantitativo de riesgo, entre otros (DNV, 2025).

HAZID, HAZOP y LOPA (por sus siglas en inglés) son metodologías clave en la ingeniería de seguridad para identificar y evaluar riesgos en procesos industriales:

**HAZID:** (Identificación de Peligros). Se enfoca en peligros generales en etapas tempranas.

**HAZOP:** (Análisis de Peligros y Operabilidad). Analiza sistemáticamente desviaciones del proceso

**LOPA:** (Análisis de Capas de Protección). Cuantifica el riesgo, evaluando la probabilidad de fallas y la efectividad de las barreras de seguridad.

Para garantizar la fiabilidad de las zonas de afectación calculadas, esta investigación se fundamenta en los modelos matemáticos integrados en el software PHAST, cuya robustez ha sido documentada técnicamente. Al respecto, Witlox y Oke (2008) presentaron un estudio exhaustivo de verificación y validación de dichos modelos, abarcando desde la física de la descarga de fluidos incluyendo liberaciones de gases y flujos bifásicos hasta los efectos térmicos resultantes. En su análisis, contrastaron las predicciones del software con datos experimentales a gran escala, demostrando una sólida concordancia tanto para la geometría y radiación de incendios tipo jet fire y pool fire, como para la dispersión atmosférica de nubes inflamables. Esta validación respalda la capacidad de la herramienta para representar con precisión los fenómenos accidentales evaluados en el presente trabajo.

#### **PHAST™ es aplicable a:**

- Refinerías: Evaluación de incendio por escape de combustible.
- Petroquímica: Simulación de fuga de amoníaco en planta de fertilizantes.
- Transporte de sustancias peligrosas: Análisis de consecuencias en caso de accidente de camión cisterna.
- Gasoductos: Modelado de explosión por ruptura de tubería a alta presión.

#### **Casos Internacionales:**

- De acuerdo con Kramer, 2023. La administración de seguridad de materiales peligrosos y tuberías (PHMSA) de Washington aprobó la petición de DNV para la versión 8.4 de PHAST™ como un modelo alternativo para calcular las zonas de exclusión de dispersión de vapor inflamable.

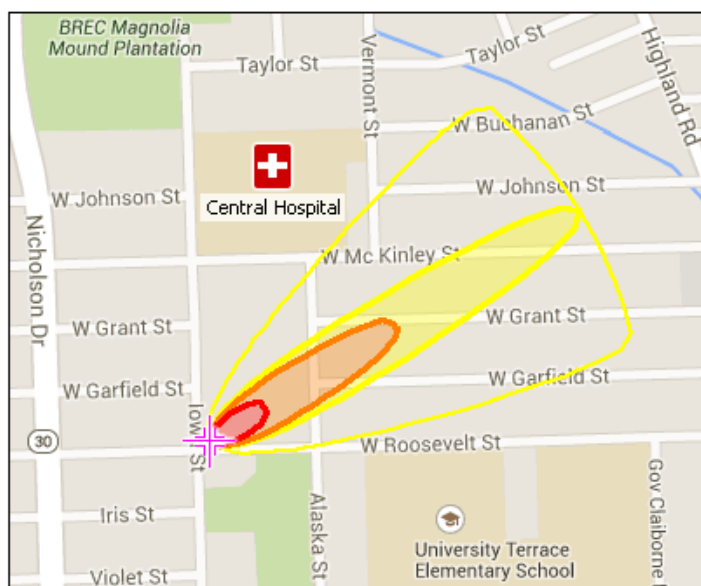
### **3.2 ÁREAS DE LOCALIZACIÓN DE ATMÓSFERAS PELIGROSAS (POR SUS SIGLAS EN INGLÉS ALOHA™)**

ALOHA™ (Areal Locations of Hazardous Atmospheres) es una herramienta de simulación para emergencias químicas, que estima las zonas de nubes tóxicas, incendios y explosiones. Se utiliza para planificar y responder a incidentes, y funciona junto con el paquete de software CAMEO, el cual ofrece una base de datos detallada de sustancias proporcionada por la página oficial de la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (Environmental Protection Agency, EPA, por sus siglas en inglés) y la NOAA (Administración Nacional Oceánica y Atmosférica) (Saturnino, 2024).

ALOHA™ calcula la dispersión de sustancias químicas, modela diferentes escenarios de liberación y puede generar resultados específicos en mapas. Permite introducir detalles sobre un derrame químico real o potencial y, posteriormente, generar estimaciones de zonas de amenaza para diversos tipos de peligros. ALOHA™ puede modelar nubes de gases tóxicos, nubes de gases inflamables, BLEVE (Explosiones de Vapor Expansivo de Líquido en Ebullición), incendios de chorro, incendios de charco y explosiones de nubes de vapor (EPA, 2025).

Para ello, el programa permite ingresar datos sobre las características de la sustancia (estado físico, toxicidad, inflamabilidad), las condiciones meteorológicas (dirección y velocidad del viento, temperatura, nubosidad, estabilidad atmosférica) y los parámetros de la fuga (tamaño, presión, caudal, duración) (Saturnino, 2024).

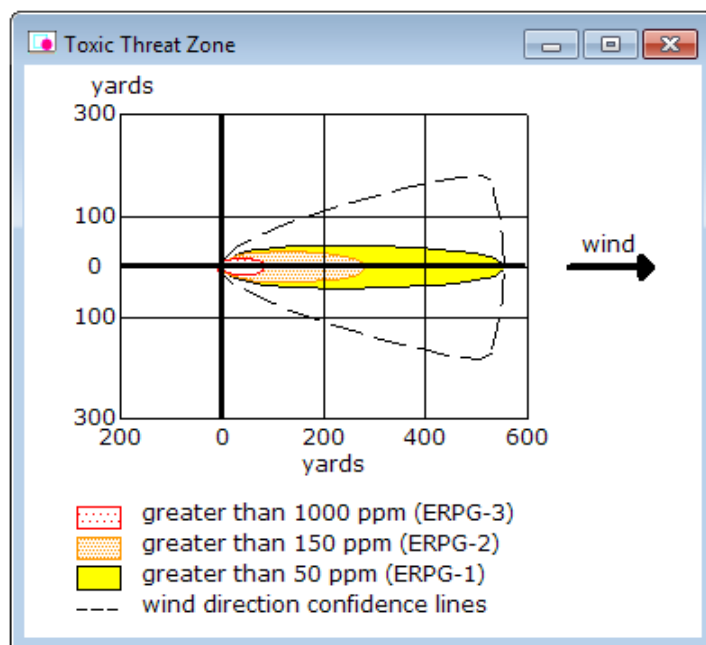
Las estimaciones de zonas de amenaza se muestran en una cuadrícula en ALOHA™ y también se pueden representar en mapas con MARPLOT™ (Aplicación de Cartografía para Respuesta, Planificación y Tareas Operativas Locales), ArcMap de ESRI, Google Earth y Google Maps, herramientas que permiten visualizar los escenarios en mapas, ver Figura 3.9.



**Figura 3.9. Software MARPLOT™ de objetos en mapas con ALOHA™. Fuente: EPA, 2025.**

El software genera resultados en forma de zonas de amenaza codificadas por los siguientes colores (ver Figura 3.10):

- Rojo: Representa el nivel de riesgo más alto o de máxima peligrosidad.
- Naranja: Zona de riesgo significativo y peligro decreciente.
- Amarillo: Área de menor riesgo, pero aún relevante para la seguridad con peligro decreciente.



**Figura 3.10. Representación de una zona de amenaza tóxica de ALOHA™. Fuente: EPA, 2025.**

ALOHA™ se ha convertido en un recurso esencial en la planificación de emergencias, capacitación de brigadas de protección civil y análisis de riesgo industrial. Sin mencionar que constituye un apoyo técnico fundamental para la gestión de emergencias químicas, ya que facilita el uso de resultados visuales con la toma de decisiones en situaciones críticas.

De acuerdo con EPA:

### Principales funciones

- Modelado de dispersión atmosférica: Predice cómo se moverá y dispersará una nube tóxica, inflamable o explosiva.
- Simulación de incendios y explosiones: Permite estimar el radio de afectación por calor, radiación térmica y sobrepresión.
- Zonas de amenaza: Genera áreas de peligro con códigos de colores (rojo, naranja, amarillo) según la concentración o el nivel de riesgo.
- Compatibilidad: Se puede trabajar junto con MARPLOT™ (para mapas) y CAMEO™ (para bases de datos químicas).

### Aplicaciones principales

- Planificación de emergencias químicas.
- Respuesta rápida ante fugas, incendios o explosiones.
- Capacitación de brigadas de protección civil.
- Apoyo en estudios de análisis de riesgo.

Sin embargo, la precisión disminuye en condiciones de mezcla atmosférica reducida, como velocidades de viento bajas (menos de 1.3 m/s o 5 km/h) o condiciones atmosféricas muy estables (clases de estabilidad E y F). En estos casos, el software subestima los niveles de concentración. Además, ALOHA™ no muestra la zona de amenaza si la distancia máxima a un nivel tóxico específico es inferior a 10 metros. ALOHA™ no tiene en cuenta los efectos de los subproductos de la combustión, las partículas ni las reacciones químicas que puedan ocurrir entre el gas liberado y componentes atmosféricos como el oxígeno o el vapor de agua.

Además, la sustancia liberada debe ser un componente puro, ya que ALOHA™ no admite la definición de mezclas, salvo en el caso de algunas soluciones seleccionadas (Saturnino, 2024).

### **ALOHA™ no tiene en cuenta algunos efectos**

Según el Office of Response and Restoration, National Oceanic and Atmospheric Administration en 2012 al utilizar ALOHA™ se debe tener presente que el software no contempla los efectos de:

- **Subproductos de incendios, explosiones o reacciones químicas.** ALOHA™ no tiene en cuenta los subproductos de la combustión (como el humo) ni las reacciones químicas. El humo de un incendio, al calentarse, asciende antes de desplazarse a favor del viento. ALOHA™ no tiene en cuenta este ascenso inicial. ALOHA™ asume que una nube en dispersión no reacciona con los gases que componen la atmósfera, como el oxígeno y el vapor de agua. Sin embargo, muchas sustancias químicas reaccionan con el aire seco o húmedo, el agua, otras sustancias químicas o incluso consigo mismas. Debido a estas reacciones químicas, la sustancia química que se dispersa a favor del viento podría ser muy diferente de la que escapó originalmente del confinamiento. En algunos casos, esta diferencia puede ser suficiente para que las predicciones de dispersión de ALOHA™ sean inexactas.
- **Partículas.** ALOHA™ no tiene en cuenta los procesos que afectan la dispersión de partículas (incluidas las partículas radiactivas).
- **Mezclas químicas.** ALOHA™ está diseñado para modelar la liberación y dispersión de sustancias químicas puras y algunas soluciones seleccionadas; la información de propiedades de su biblioteca química no es válida para mezclas de sustancias químicas.
- **Cambios de viento y efectos de dirección del terreno.** ALOHA™ asume que la velocidad y dirección del viento son constantes en toda la zona a sotavento de un derrame químico. ALOHA™ también espera que el suelo bajo una nube en dispersión sea plano. Sin embargo, en realidad, el viento suele cambiar de velocidad y dirección al fluir cuesta arriba o cuesta abajo, entre colinas o al descender hacia valles, girando donde lo hacen las características del terreno. En zonas urbanas, el viento que fluye alrededor de grandes edificios forma remolinos y cambia de dirección y velocidad, alterando significativamente la forma y el movimiento de una nube. ALOHA™ ignora estos efectos al generar una estimación de la zona de amenaza.

- **Terreno.** ALOHA™ asume que el terreno es plano, lo cual tiene diferentes implicaciones según el escenario de liberación. Para liberaciones de líquidos, ALOHA™ no considera la acumulación de agua en depresiones ni el flujo de líquido en terrenos inclinados. ALOHA™ asume que el líquido se distribuye uniformemente en todas direcciones, lo que puede sobreestimar el tamaño del charco y la velocidad de liberación cuando el terreno no es plano. Para liberaciones de gas, ALOHA™ no considera los cambios en el flujo del viento que pueden ocurrir al desviar la nube por edificios altos y montañas.
- **Fragmentos peligrosos.** Si un derrame químico implica una explosión, se proyectarán escombros del contenedor y del área circundante. ALOHA™ no modela las trayectorias de los fragmentos peligrosos.

### 3.3 ASPEN PLUS™

El ASPEN PLUS™ es un software de simulación desarrollado por la empresa AspenTech y ampliamente utilizado en la ingeniería química, petroquímica, farmacéutica, energética y ambiental. Su función principal es permitir el diseño, análisis y optimización de procesos industriales a través de modelos matemáticos y termodinámicos que representan operaciones unitarias y sistemas de producción completos (AspenTech, 2025). En la Figura 3.11 es posible observar el logo del software.



*Figura 3.11. Logo de ASPEN PLUS™. Fuente: Universidad de los Andes, 2024.*

#### **Metodología de uso general de ASPEN PLUS™**

El uso de ASPEN PLUS™ requiere la definición de una serie de datos de entrada que permiten configurar adecuadamente la simulación y obtener resultados realistas. En primer lugar, es necesario especificar los componentes químicos que formarán parte del proceso, ya sea seleccionándolos de la extensa base de datos incluida en el software o, en caso de sustancias no convencionales, introduciendo sus propiedades físicas y termodinámicas de manera manual. Este flujo de trabajo inicial es fundamental en la formación académica estandarizada, tal como se establece en los tutoriales instruccionales de la Universidad de Washington (s.f.) y los cursos especializados del National Programme on Technology Enhanced Learning, NPTEL por sus siglas

en inglés en 2023, donde se prioriza la correcta definición de componentes como paso crítico previo a la simulación.

Una vez definidos los componentes, el usuario debe elegir el modelo termodinámico más apropiado para describir el equilibrio de fases y las propiedades de mezcla. Entre los más utilizados se encuentran el NRTL (*Non-Random Two-Liquid*), adecuado para sistemas no ideales líquidos; el Peng-Robinson, empleado en hidrocarburos y gases a alta presión; y el UNIQUAC, recomendado para mezclas líquidas complejas. La correcta selección del modelo termodinámico es crucial, ya que influye directamente en la precisión de los cálculos de equilibrio.

Posteriormente, se deben establecer las condiciones de operación de las corrientes de entrada, tales como temperatura, presión, caudal de masa o molar y composición. Estos datos iniciales permiten que ASPEN PLUS™ realice los balances de materia y energía en cada etapa del proceso. Asimismo, es indispensable describir los equipos de proceso que formarán parte del diagrama de flujo, como columnas de destilación, intercambiadores de calor, reactores, bombas, compresores o separadores, definiendo los parámetros de diseño y operación de cada uno, siguiendo la lógica de construcción de *flowsheets* descrita en la literatura técnica docente (Department of Chemical Engineering, s.f.; NPTEL, 2023).

### **Características distintivas**

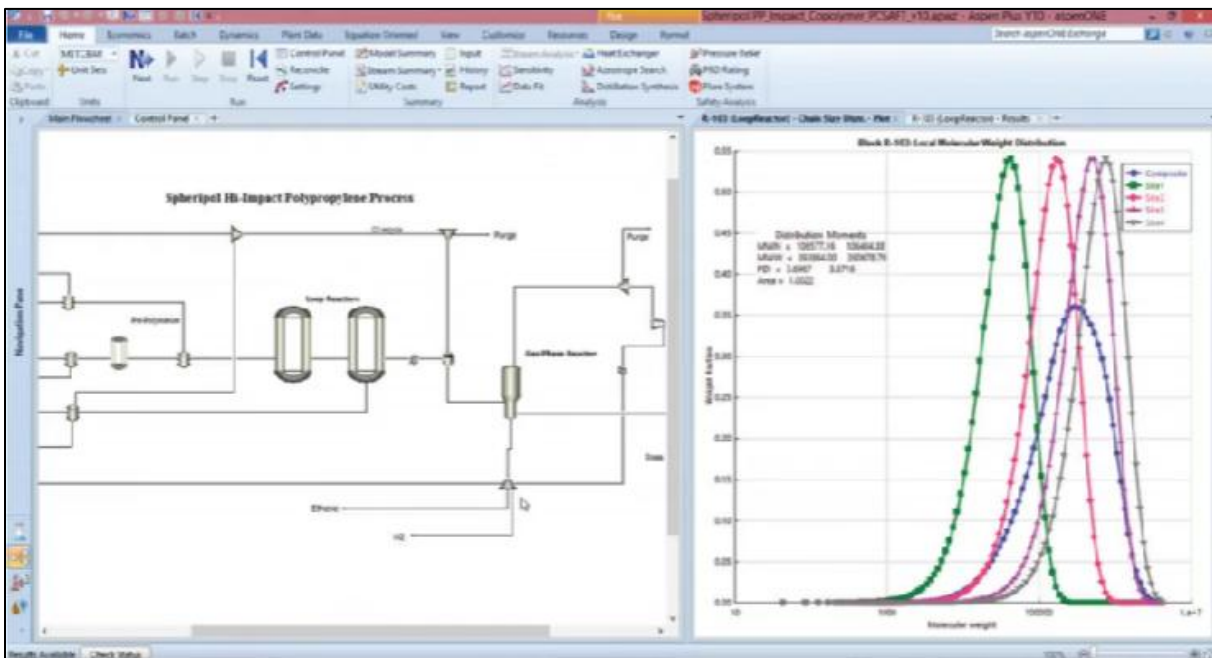
- Bibliotecas termodinámicas extensas (equilibrios de fases, coeficientes de actividad, EOS).
- Amplia base de datos de sustancias químicas.
- Bloques de simulación de operaciones unitarias (destilación, absorción, extracción, reacción, secado, etc.).
- Optimización integrada (parámetros de operación y diseño).
- Interfaz gráfica intuitiva: diagramas de flujo de procesos con corrientes y equipos.
- Modelado del ciclo de vida desde el diseño hasta las operaciones, optimizado con IA integrada y computación de alto rendimiento para optimizar el desarrollo de procesos.

En cuanto a su aplicación, ASPEN PLUS™ es utilizado para el diseño y simulación de operaciones unitarias tales como destilación, absorción, extracción líquido-líquido, secado, combustión y reacciones químicas. También se emplea en la optimización energética y económica de plantas industriales, al permitir evaluar alternativas de operación que reduzcan costos de producción y consumo energético. Asimismo, es una herramienta clave en el escalamiento de procesos, ya que posibilita pasar de estudios de laboratorio o planta piloto a procesos a nivel industrial con un mayor grado de certeza y menor riesgo de inversión (AspenTech, 2025).

Dentro de sus productos más notables para el sector químico es posible obtener (ver Figura 3.12):

- Balances de masa y energía de todo el sistema.
- Diagramas de fases y propiedades termodinámicas.
- Composición de corrientes (entradas, salidas, recirculación).
- Consumo energético en equipos.

- Curvas de operación (número de etapas óptimas en destilación).



**Figura 3.12. Modelado riguroso de procesos integrados de ASPEN PLUS™. Fuente: AspenTech, 2025.**

El software también genera información sobre la composición de corrientes, el comportamiento de reacciones químicas, los requerimientos energéticos de equipos como intercambiadores de calor o columnas de destilación, y el desempeño global de una planta.

### Usos principales

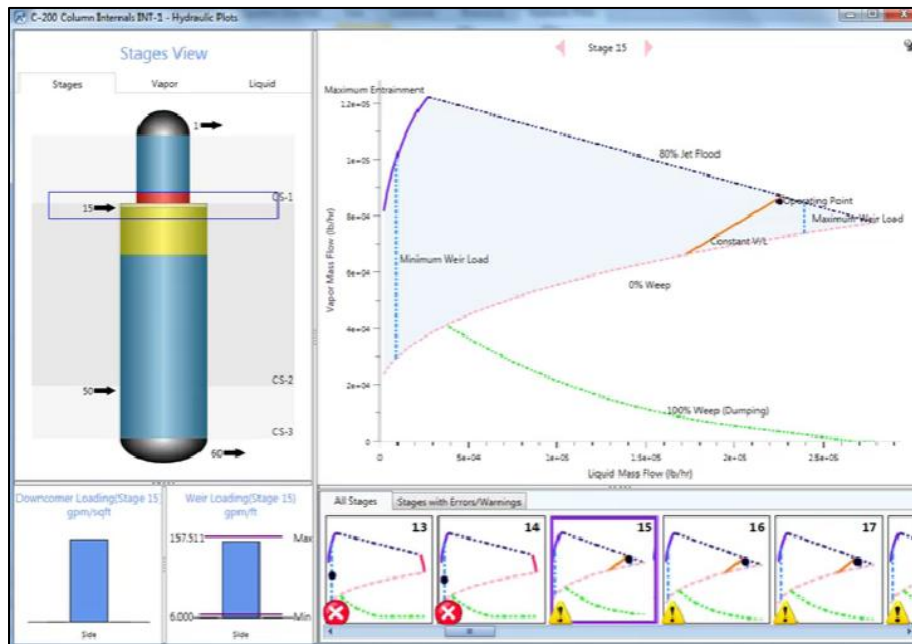
- Diseño de columnas de destilación, esta aplicación es muy presente en el área de la petroquímica.
- Optimización de plantas de energía.
- Evaluación de procesos de captura de CO<sub>2</sub>.
- Diseño de plantas farmacéuticas y de procesos biotecnológicos.
- Estudios ambientales: Emisiones, eficiencia energética, procesos de reciclaje.

### Principales aplicaciones

- Diseño de procesos: Creación de diagramas de flujo (PFD) con corrientes y equipos.
- Optimización energética y de costos: Búsqueda de condiciones más eficientes para reducir consumo y maximizar producción.
- Modelado de reacciones químicas: Permite introducir cinéticas químicas o recurrir a bases de datos termodinámicas.
- Simulación de estados estacionarios y dinámicos: Se usa tanto para diseño como para control de procesos.

- Estudios de viabilidad y escalamiento: Pasar de planta piloto a planta industrial con menor incertidumbre.

En la Figura 3.13 es posible observar estas aplicaciones para la visualización hidráulica por destilación.

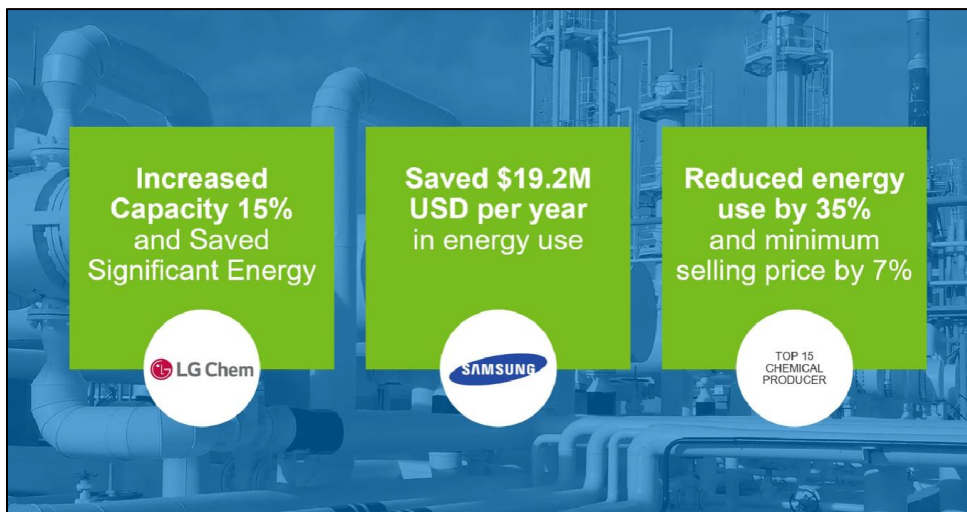


**Figura 3.13. Visualización hidráulica por destilación de ASPEN PLUS™. Fuente: AspenTech, 2025.**

### Algunos logros de ASPEN PLUS™ de acuerdo con la página de AspenTech en 2025

- ACME Group selecciona a Aspen Technology para impulsar la excelencia operativa en su primera planta piloto de hidrógeno y amoníaco ecológicos – 31 de agosto de 2022. Amit Sharma, vicepresidente de Ingeniería del Grupo ACME, afirmó: “El Grupo ACME ha elegido la solución de Ingeniería de Rendimiento de ASPEN™ para diseñar el proceso de hidrólisis en su planta piloto de hidrógeno y amoníaco verdes y, posteriormente, optimizar la configuración del proceso para plantas de amoníaco verdes a gran escala. ASPEN™ demostró sólidas capacidades de modelado con modelos de muestra en hidrógeno verde utilizando ASPEN PLUS™. Con experiencia en industrias de procesos con alta inversión de capital, ASPEN™ es el socio ideal en nuestra búsqueda de la excelencia operativa para mantenernos a la vanguardia de las tendencias del sector”.
- Nissan Chemical desarrolla un modelo de reformador de vapor más rápido y preciso utilizando ASPEN HYBRID MODELS™. Utilizando los modelos híbridos de ASPEN™, Nissan Chemical logró crear un modelo que reproduce datos reales de la planta con mayor precisión y el doble de velocidad que el modelo de reformador convencional.

Algunos otros logros obtenidos por otras empresas internacionales como LG™ que incrementó el 15% de capacidad y ahorró energía, SAMSUNG™ que ahorró \$19.2 M de dólares por año en uso de energía utilizando ASPEN PLUS™ pueden verse en la Figura 3.14 obtenida de la página oficial de ASPEN™. Por lo que se puede apreciar que el principal beneficio es la reducción de energía utilizada y por consecuencia su presupuesto.



**Figura 3.14. Resultados de algunas empresas de la gestión energética de ASPEN PLUS™. Fuente: AspenTech, 2025.**

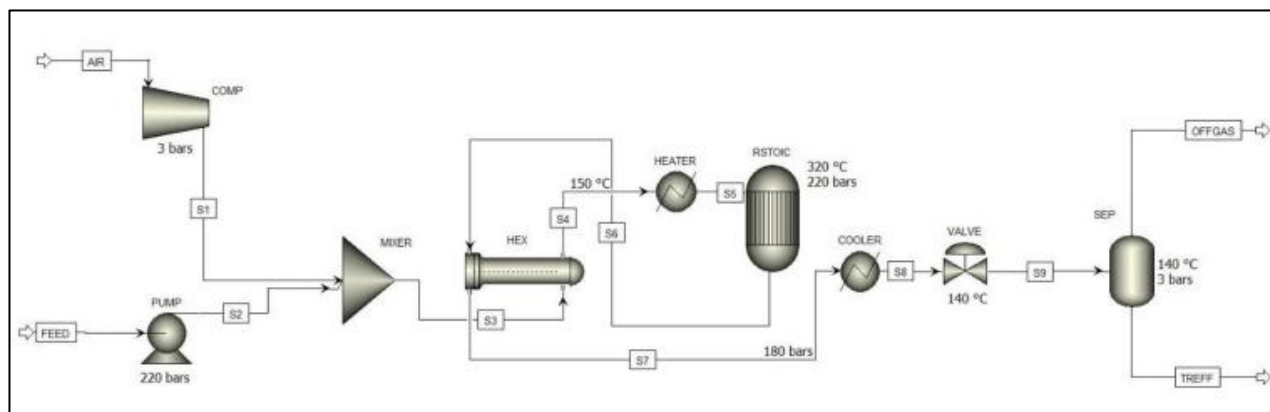
En la Figura 3.15 se observa el mayor beneficio de utilizar ASPEN PLUS™ para el análisis ambiental y de seguridad es “Ahorrar tiempo y hacer más eficiente el uso de las horas de la ingeniería”.



**Figura 3.15. Resultados de algunas empresas de la gestión energética de ASPEN PLUS™. Fuente: AspenTech, 2025.**

Más allá de sus aplicaciones tradicionales en la industria de hidrocarburos, ASPEN PLUS™ ha demostrado ser una herramienta fundamental en la ingeniería ambiental y el tratamiento de residuos peligrosos. Un ejemplo reciente de esta versatilidad es el estudio realizado por Tager et al. (2023), quienes utilizaron el software para diseñar y optimizar un proceso de oxidación húmeda con aire destinado al tratamiento de aguas residuales hospitalarias. En la Figura 3.16 se muestra el diagrama de flujo del proceso mencionado.

En dicha investigación, se empleó el paquete termodinámico SRK (Soave-Redlich-Kwong) para simular la degradación de contaminantes biológicos y químicos altamente tóxicos bajo condiciones extremas de temperatura (320°C) y presión (220 bar). La capacidad de ASPEN PLUS™ para modelar reactores complejos permitió predecir con alta precisión la mineralización de compuestos nocivos, logrando una reducción del 79.1% en la Demanda Química de Oxígeno (DQO) y del 88% en la Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO5). Además, el entorno de simulación facilitó la optimización de parámetros operativos críticos (como la relación aire/residuo y la temperatura del separador flash) validando los resultados con un margen de error inferior al 5% respecto a datos experimentales. Esto subraya la capacidad del software para garantizar la seguridad y eficiencia en procesos donde la experimentación física conlleva altos riesgos biológicos.



**Figura 3.16. Diagrama de flujo del proceso de oxidación húmeda con aire en ASPEN PLUS™.**  
Fuente: Tager et al, 2023.

ASPEN PLUS™ se ha consolidado como un software esencial en la ingeniería de procesos debido a su versatilidad, rigor termodinámico y capacidad de integración con herramientas de optimización. Esto lo convierte en un recurso valioso tanto en el ámbito académico como en la industria, al facilitar la creación de modelos confiables que mejoran la eficiencia, la seguridad y la sustentabilidad de los procesos industriales.

### 3.4 ASPEN HYSYS™

ASPEN HYSYS™ es un software de simulación de procesos especializado en la industria del gas, petróleo y refinación, aunque también se aplica en energía y procesos químicos generales. Su fortaleza principal radica en el modelado de hidrocarburos, gases naturales, criogenia y operaciones dinámicas, siendo uno de los programas más utilizados en plantas de gas y refinerías.

Mientras que ASPEN PLUS™ se centra más en simulación de procesos químicos generales y diseño termodinámico, ASPEN HYSYS™ se orienta a procesos de hidrocarburos, modelado dinámico y operaciones de estado transitorio (arranques, paradas, disturbios en planta) (AspenTech, 2025). En la Figura 3.17 es posible observar el logo del software.



**Figura 3.17. Logo de ASPEN HYSYS™. Fuente: Google Play, 2021.**

Dentro de sus productos más notables para el sector químico es posible obtener:

- Balances de materia y energía.
- Composición de corrientes en cada punto del proceso.
- Eficiencia energética de equipos y sistemas.
- Simulación dinámica de arranques y paradas de planta.
- Escenarios de seguridad ante fallos de equipos o cambios de condiciones.

### **Metodología de uso general de ASPEN HYSYS™**

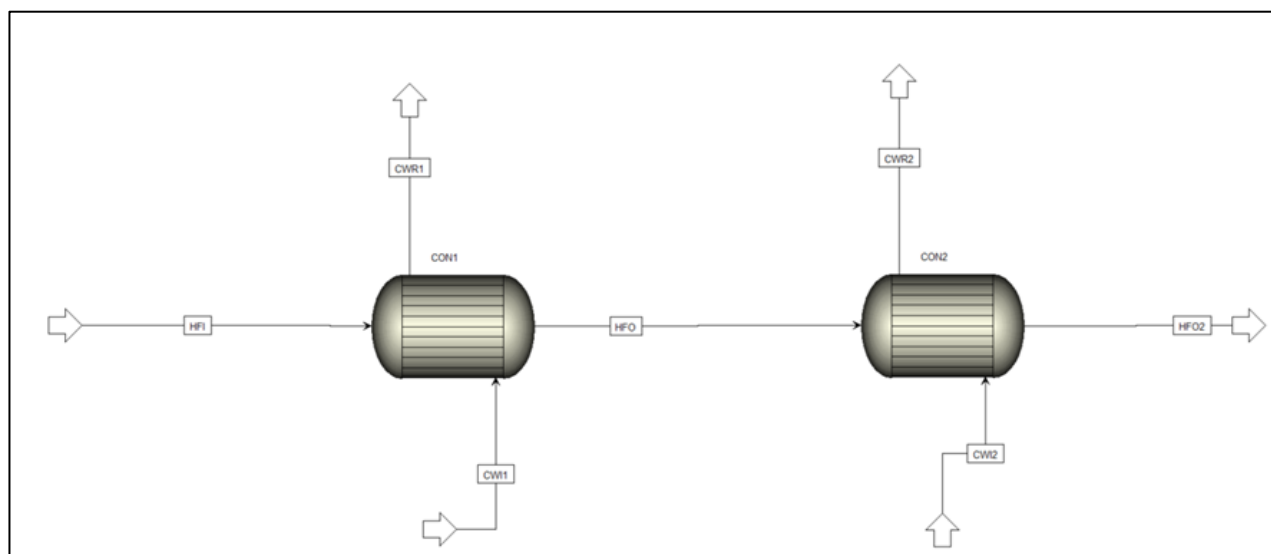
La correcta configuración de una simulación en ASPEN HYSYS™ depende de la definición precisa de los datos de entrada, los cuales constituyen la base para que el software pueda reproducir de manera realista el comportamiento de los procesos industriales. En primer lugar, se debe establecer el sistema de componentes químicos que formarán parte de la simulación. HYSYS™ dispone de una amplia base de datos orientada principalmente a hidrocarburos, gases y compuestos utilizados en la industria del petróleo y gas natural, aunque también permite la incorporación de componentes definidos por el usuario en caso de sustancias no incluidas. Para garantizar la integridad de esta configuración inicial, se recomienda seguir los protocolos de operación estándar descritos en guías académicas como la de la Universidad de Alberta (2006), que detallan el procedimiento paso a paso para la definición del entorno de simulación.

Posteriormente, es necesario seleccionar el modelo termodinámico que representará el equilibrio de fases y las propiedades de los sistemas de interés. Entre los modelos más empleados se encuentran el Peng-Robinson y el Soave-Redlich-Kwong (SRK) para hidrocarburos y gases a alta presión, así como el GERG para mezclas complejas de gas natural. La elección adecuada del

paquete termodinámico es fundamental, ya que determina la precisión de los cálculos de propiedades físicas, entalpías, coeficientes de fugacidad y fracciones de equilibrio.

Una vez definida la base termodinámica, se deben especificar las condiciones de operación de las corrientes de entrada, como temperatura, presión, caudal y composición. Estos datos iniciales permiten que HYSYS™ realice los balances de materia y energía a lo largo del proceso. A continuación, el usuario debe configurar los equipos de proceso que se integrarán en el diagrama de flujo, tales como separadores, columnas de destilación, compresores, bombas, intercambiadores de calor y reactores (ver Figura 3.18). La construcción lógica de este diagrama de flujo (*flowsheet*), así como el uso de herramientas de convergencia como los bloques lógicos (*Adjust* o *Balance*), debe alinearse con las mejores prácticas de modelado impartidas por AspenTech (s.f.), asegurando así que la topología del proceso sea robusta antes de introducir parámetros específicos de diseño, como el número de etapas en una columna o la eficiencia de los compresores.

Finalmente, en el caso de simulaciones dinámicas, HYSYS requiere la definición de parámetros adicionales asociados al control del proceso, como la ubicación de válvulas de control, la sintonización de controladores PID y las capacidades de almacenamiento de tanques y equipos. Estos datos permiten al software representar el comportamiento transitorio de la planta en escenarios de arranque, parada o disturbios operativos (AspenTech, 2025).



**Figura 3.18. Diagrama de corriente de vapor y agua de ASPEN HYSYS™. Fuente: AspenTech, 2025.**

### Características clave

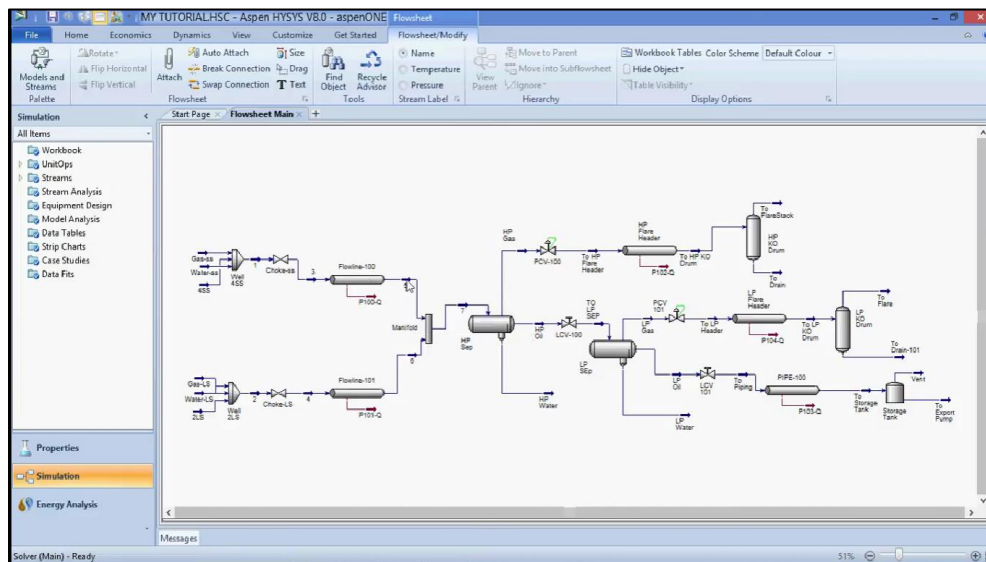
- Biblioteca de fluidos y modelos termodinámicos especializados en hidrocarburos y mezclas de gas.
- Capacidad dinámica: permite modelar procesos en estado transitorio (a diferencia de ASPEN PLUS™, que es principalmente de estado estacionario).

- Interfaz intuitiva con diagramas de flujo que facilitan la construcción de procesos complejos.
- Integración con herramientas de seguridad como análisis de HAZOP, PSV (válvulas de seguridad) y estudios de sobrepresión.
- Compatibilidad con ASPEN PLUS™: Se pueden intercambiar modelos entre ambos simuladores para estudios complementarios.

### Aplicaciones principales

- Procesamiento de gas natural: Deshidratación, endulzamiento, separación criogénica, licuefacción.
- Refinación de petróleo: Modelado de destilación atmosférica y al vacío, hidrotratamiento, craqueo catalítico.
- Optimización de plantas energéticas: Turbinas de gas, ciclos combinados, eficiencia térmica.
- Simulación dinámica: Entrenamiento de operadores y análisis de seguridad mediante escenarios de operación realistas.
- Estudios de seguridad y riesgos: Cálculo de alivio de presión, análisis de venteo y quemadores de emergencia.
- En el ámbito del tratamiento de aguas industriales, el software es esencial para el diseño de unidades de despojamiento de "aguas agrias", facilitando la eliminación eficiente de contaminantes tóxicos como el sulfuro de hidrógeno ( $H_2S$ ) y el amoníaco ( $NH_3$ ).

En la Figura 3.19 es posible observar una simulación de fluidos aplicando la interfaz de diagrama de flujo y estudios de sobrepresión.



### 3.5 DWSIM™

DWSIM™ es un simulador de procesos químicos de código abierto y gratuito para estado estacionario y dinámico, que permite modelar plantas y operaciones unitarias mediante diagramas de flujo, balances de masa y energía. Es una herramienta de software multiplataforma disponible para Windows™, Linux™, macOS™, Android™ e iOS™, que es compatible con el estándar CAPE-OPEN™ y ofrece características avanzadas de simulación que antes solo estaban en software comercial. Su accesibilidad y flexibilidad lo hacen popular tanto en educación como en investigación y pequeñas industrias que necesitan modelar procesos sin invertir en licencias costosas (DWSIM, 2025). En la Figura 3.20 es posible observar el logo del software.



**Figura 3.20. Logo de DWSIM™. Fuente: DWSIM, 2025.**

Dentro de sus productos más notables para el sector químico es posible obtener:

- Balances de materia y energía.
- Composición de corrientes y propiedades de cada flujo.
- Diagramas de fases y propiedades termodinámicas.
- Desempeño de equipos de proceso: Eficiencia, capacidad y carga térmica.
- Simulación dinámica y análisis de escenarios.

### Funciones



**Figura 3.21. Funciones de DWSIM™. Fuente: DWSIM, 2025.**

En la Figura 3.21 es posible observar las funciones principales que se presentan de DWSIM™ obtenidas de la página oficial. Además, de acuerdo con la página oficial DWSIM™ en 2026, se tienen registradas las siguientes funciones:

- **Características de CAPE-OPEN (Windows):** Socket de paquete de propiedades Thermo 1.0/1.1, servidor de paquete de propiedades Thermo 1.1, socket de operación unitaria y compatibilidad con objetos de monitorización de diagramas de flujo. Además, DWSIM™ expone su operación unitaria de script Python (personalizada) para todos los simuladores compatibles con CAPE-OPEN™.
- **Modelos termodinámicos:** GERG-2008, PC-SAFT, CoolProp, Peng-Robinson, Peng-Robinson (1978), Soave-Redlich-Kwong, Lee-Kesler, Lee-Kesler-Plöcker, UNIFAC, UNIFAC modificado (Dortmund), UNIQUAC, NRTL, Chao-Seader, Grayson-Streed, ley de Raoult, tablas de vapor IAPWS-IF97, agua de mar IAPWS-08, aceite negro, agua ácida y electrolitos acuosos.
- **Modelado y simulación dinámica:** Controlador PID, programador de eventos, variables monitoreadas, integrador configurable, matrices de causa y efecto, modo de panel de control (tiempo real), indicadores, medidores analógicos y digitales, campos de entrada e interruptores.
- **Operaciones unitarias (estado estacionario):** Mezclador, divisor, separador, bomba, compresor, expansor, calentador, enfriador, válvula, segmento de tubería, columna de acceso directo, intercambiador de calor, reactores de conversión/equilibrio/Gibbs, PFR, CSTR, separador de componentes, placa de orificio, columnas de destilación/absorción, separador de sólidos, filtro de torta, hoja de cálculo, secuencia de comandos de Python y diagrama de flujo.
- **Operaciones unitarias (dinámicas):** Mezclador, divisor, separador, bomba, compresor, expansor, calentador, enfriador, válvula, PFR, CSTR, intercambiador de calor, hoja de cálculo y script de Python.
- **Utilidades:** Envolvente de fases, cálculos de hidratos, propiedades de componentes puros, punto crítico, dimensionamiento de PSV, dimensionamiento de recipientes, hoja de cálculo y propiedades de flujo en frío del petróleo.
- **Herramientas:** Ajuste del controlador PID, regresión de datos binarios, creador de compuestos, bulk C7+ y curvas de destilación, gestor de caracterización y reacciones del petróleo.
- **Análisis de procesos:** Utilidad de optimización restringida multivariante y análisis de sensibilidad.
- **Extras:** Sistema de scripting Python/IronPython e interfaz de complementos.

## Metodología de uso general de DWSIM™

La correcta configuración de una simulación en DWSIM™ depende de la definición precisa de los datos de entrada, los cuales permiten que el software reproduzca de manera realista el comportamiento de los procesos químicos e industriales. En primer lugar, se debe establecer el sistema de componentes químicos que formarán parte de la simulación, seleccionándolos de la base de datos integrada o ingresando manualmente las propiedades de sustancias no incluidas. Esta definición es crucial, ya que todas las operaciones unitarias y balances dependen de las características físicas y termodinámicas de los componentes.

A continuación, es necesario elegir el modelo termodinámico más adecuado para describir el equilibrio de fases y las propiedades de las mezclas. DWSIM™ ofrece modelos como Peng-Robinson, NRTL, UNIQUAC y otros, que permiten simular sistemas líquidos, gaseosos o multicomponentes con distintos grados de no idealidad. La selección correcta del paquete termodinámico asegura que los cálculos de entalpía, fugacidad, fracciones molares y composiciones sean precisos y consistentes.

Posteriormente, se deben ingresar las condiciones de operación de las corrientes de entrada, incluyendo temperatura, presión, caudal y composición. Estos datos iniciales permiten a DWSIM™ realizar los balances de materia y energía en cada etapa del proceso, desde reactores hasta columnas de separación o intercambiadores de calor.

Además, el usuario debe configurar las operaciones unitarias que componen el diagrama de flujo, tales como destiladores, reactores, intercambiadores, bombas, separadores o mezcladores, indicando los parámetros de diseño y operación correspondientes. Para procesos que incluyen reacciones químicas, se deben definir la estequiometría, la cinética de reacción y las condiciones de operación de los reactores (DWSIM, 2025).

Finalmente, como parte integral de la metodología de simulación, es fundamental validar la configuración del modelo comparando los resultados con casos estandarizados. En este contexto, la iniciativa FOSSEE (Free and Open Source Software for Education) del Instituto Indio de Tecnología (IIT Bombay) ofrece recursos de verificación clave como el “DWSIM™ Flowsheeting Project”. Esta plataforma proporciona un repositorio de cientos de esquemas de flujo que han sido migrados y validados desde literatura técnica y proyectos académicos, sirviendo como punto de referencia para asegurar que la selección de paquetes termodinámicos y operaciones unitarias converja hacia resultados físicamente realistas y confiables dentro del entorno de DWSIM™ (FOSSEE, s.f.).

### Características clave

- Código abierto y gratuito: DWSIM™ es un software gratuito bajo la licencia GPLv3, lo que permite su descarga, uso y distribución.
- Simulación de estado estacionario y dinámico: Permite modelar procesos químicos en ambos regímenes.

- Compatibilidad con CAPE-OPEN™: Cumple con este estándar, lo que permite la interoperabilidad con otros componentes y simuladores.
- Interfaz gráfica intuitiva: Ofrece una interfaz gráfica fácil de usar para construir y analizar diagramas de flujo de procesos.
- Base de datos de compuestos: Incluye una extensa base de datos con más de 1200 compuestos químicos.
- Funcionalidad sin conexión: La aplicación funciona completamente fuera de línea, sin necesidad de conexión a servidores o bases de datos en línea.
- Multilenguaje y multiplataforma: Disponible en varias plataformas, incluyendo Windows™, Linux™, macOS™, Android™ y iOS™.

### **Aplicaciones principales**

- Diseño y operación de plantas químicas: Para modelar y optimizar condiciones de procesos.
- Estudios de cuello de botella: Para identificar y resolver limitaciones en plantas existentes.
- Educación: Es una herramienta valiosa para estudiantes y profesionales de ingeniería química.
- Conexión con sistemas de control: Permite la conexión con sistemas de control para aplicaciones de formación de operadores y gemelos digitales.
- Diseño de plantas piloto y educativas.
- Simulación de procesos de destilación, absorción y reacción química.
- Evaluación de eficiencia energética y optimización de operaciones unitarias.
- Estudios de seguridad y control de procesos.
- Investigación en termofluidos y procesos químicos en universidades y laboratorios.

En las figuras 3.22, 3.23, 3.24 y 3.25 es posible observar el interfaz de algunos ejemplos de las aplicaciones principales mencionadas.

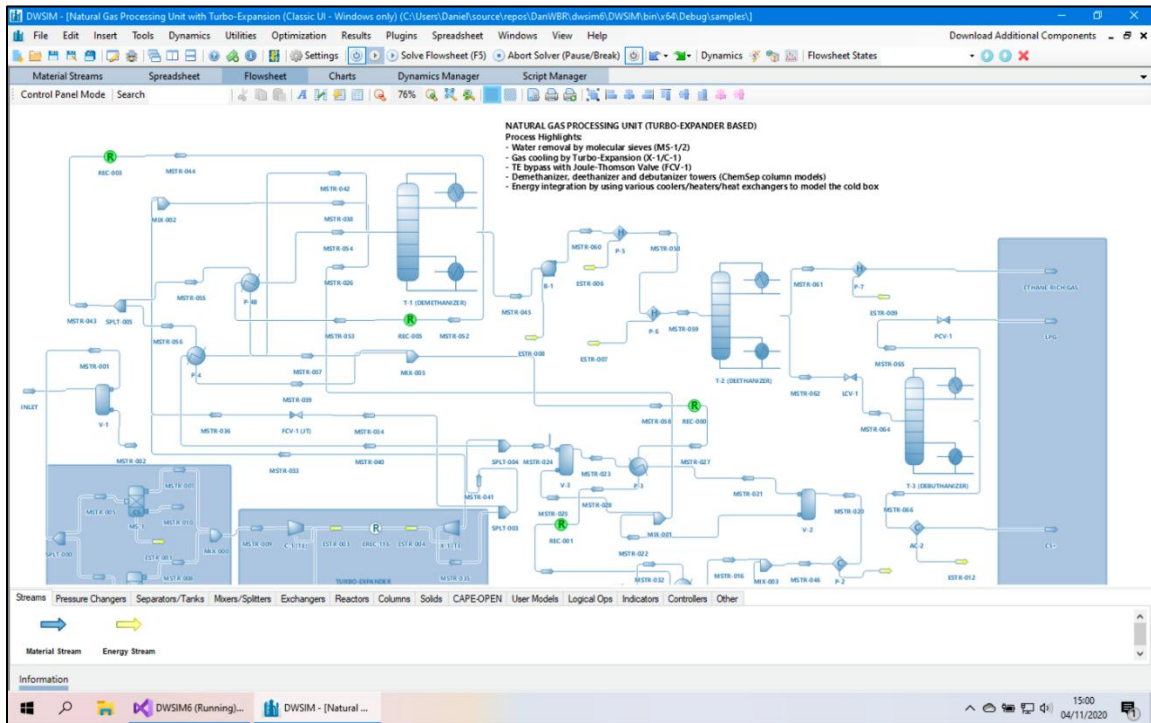


Figura 3.22. Diagrama de procesamiento de gas natural de DWSIM™. Fuente: DWSIM, 2025.

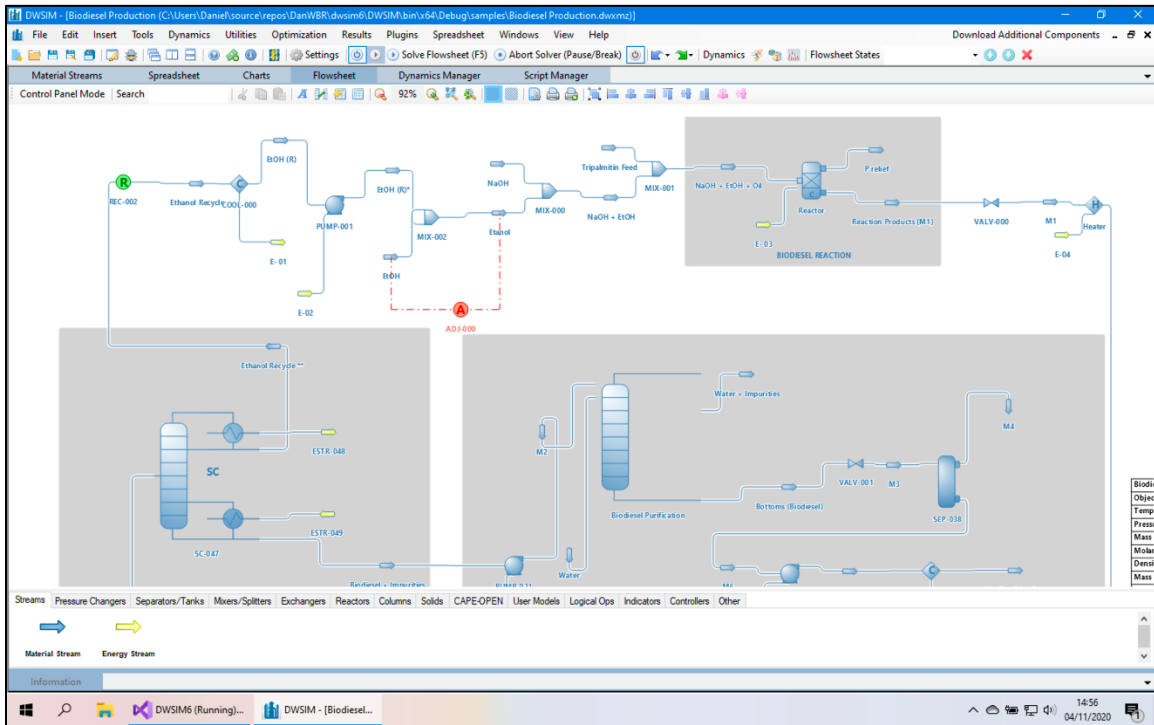


Figura 3.23. Diagrama de producción de biodiésel de DWSIM™. Fuente: DWSIM, 2025.

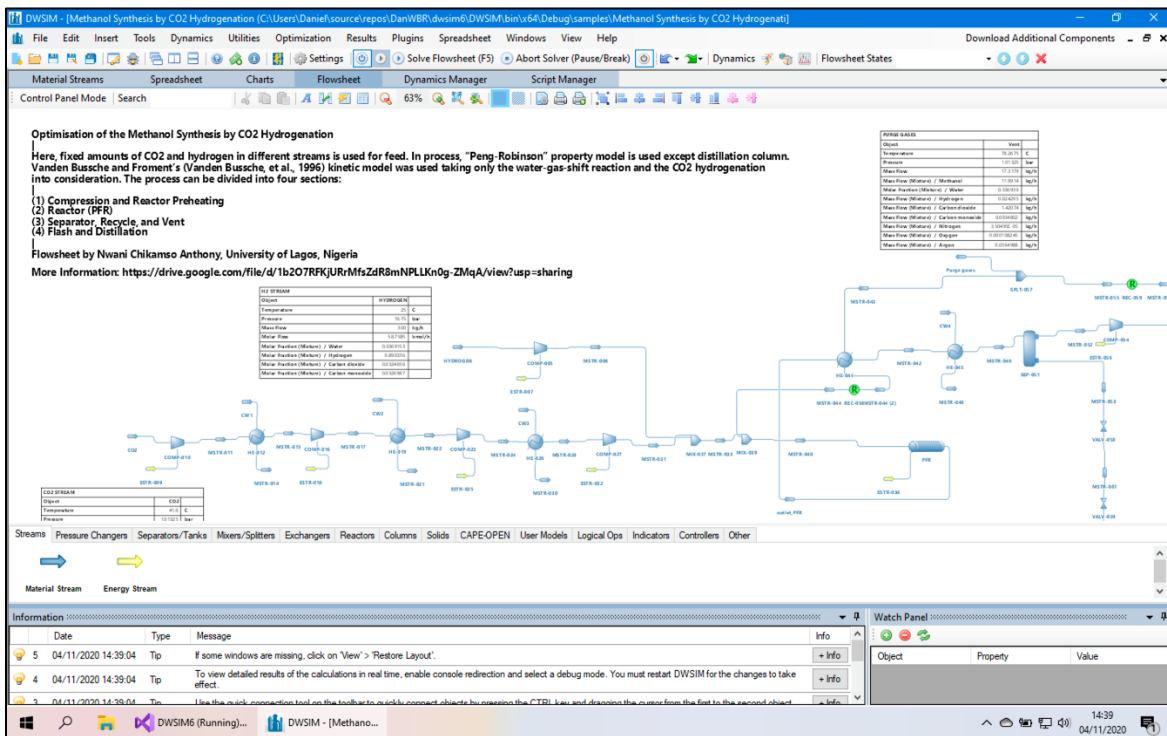


Figura 3.24. Síntesis de metanol de DWSIM™. Fuente: DWSIM, 2025.

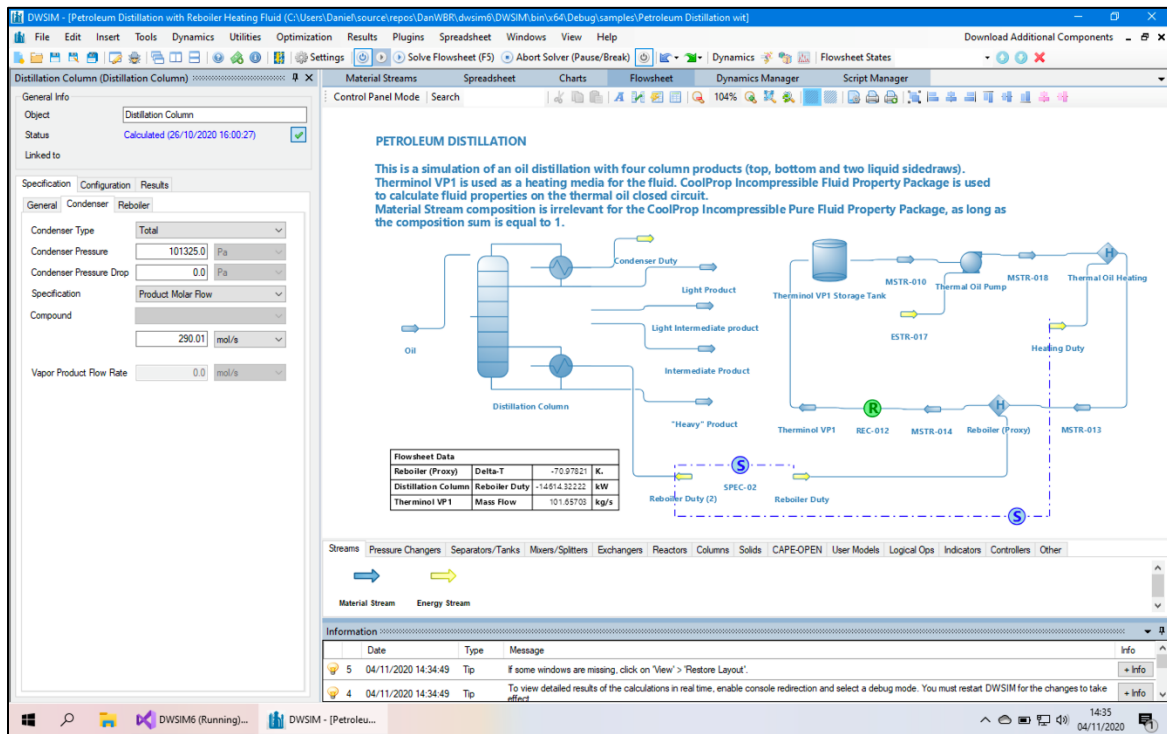
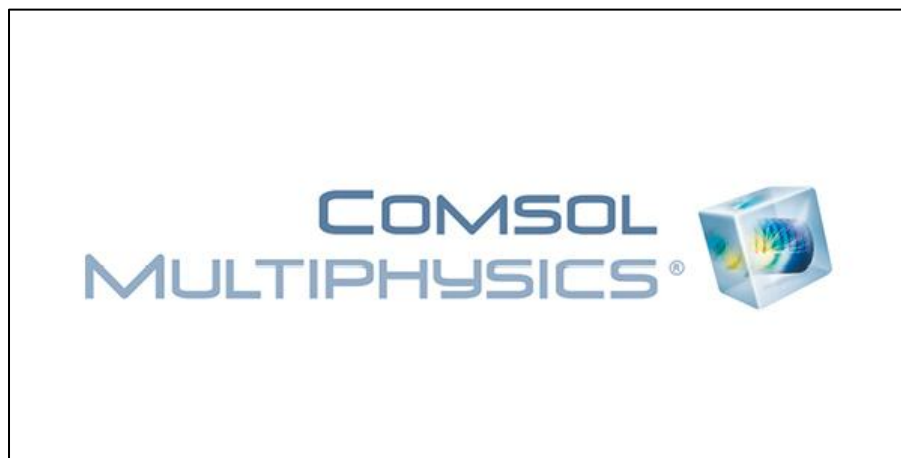


Figura 3.25. Destilación de petróleo de DWSIM™. Fuente: DWSIM, 2025.

### 3.6 COMSOL MULTIPHYSICS™

COMSOL MULTIPHYSICS™ es una herramienta de modelado y análisis para prototipaje virtual de fenómenos físicos. COMSOL MULTIPHYSICS™ puede modelar virtualmente cualquier fenómeno físico que un ingeniero o científico pueda describir con ecuaciones diferenciales parciales (PDE), incluyendo transferencia de calor, movimiento de fluidos, electromagnetismo y mecánica estructural, soportando la integración de problemas de diferentes campos – Multifísica (COMSOL, 2026). En la Figura 3.26 es posible observar el logo del software.



**Figura 3.26. Logo de COMSOL MULTIPHYSICS™. Fuente: COMSOL, 2026.**

Las prestaciones de multifísica integradas en COMSOL MULTIPHYSICS™ capacitan al usuario para simultáneamente modelar cualquier combinación de fenómenos. A través de estas prestaciones, COMSOL MULTIPHYSICS™ integra las dos formas posibles de modelar (a través de aplicaciones predefinidas que permiten crear el modelo fijando las cantidades físicas que caracterizan el problema, y a través de las ecuaciones que modelan el problema) y permite combinarlas.

La estructura sobre la que COMSOL™ trabaja es un sistema de Ecuaciones Diferenciales Parciales (PDEs), una descripción matemática de varios fenómenos físicos basados en las leyes de la ciencia. Cualquier experto en su campo que sepa cómo crear simulaciones usando PDEs puede ampliar aquellos sistemas modelando explícitamente en términos de estos tipos de ecuaciones.

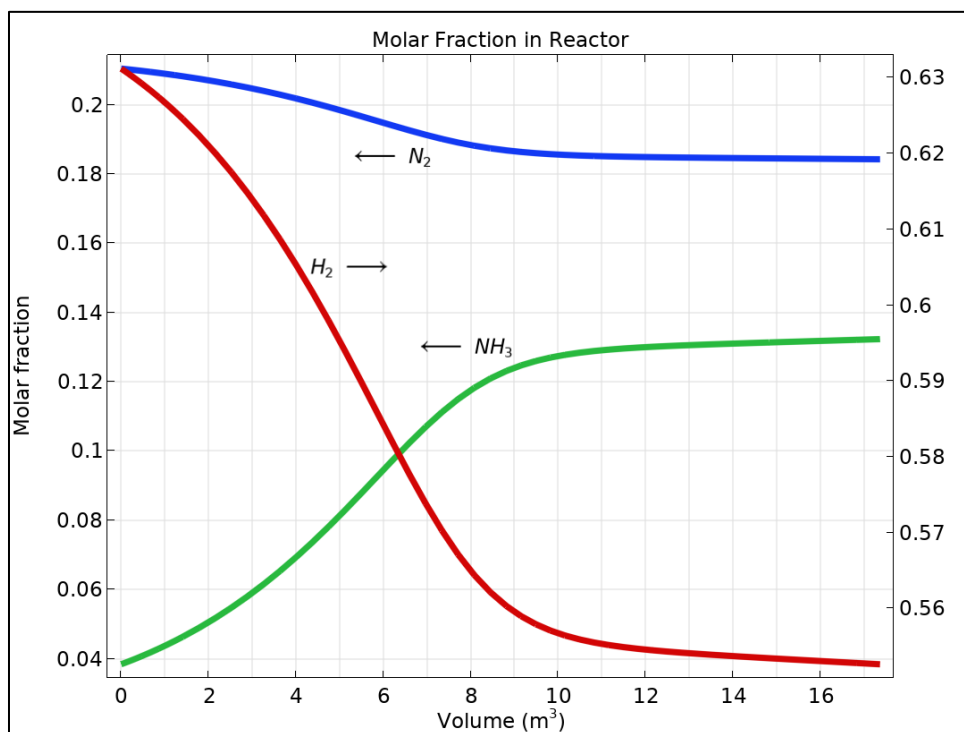
COMSOL™ es ampliamente usado en la industria química para modelar, optimizar y predecir procesos químicos antes de construir prototipos físicos, lo que ahorra tiempo y reduce costos (COMSOL, 2026).

Dentro de sus productos más notables para el sector químico es posible obtener:

- Conversión de reactivos.
- Selectividad y rendimiento de productos.
- Distribución de concentración de especies químicas.

- Coeficientes de transferencia de masa.
- Perfiles de velocidad y flujo en equipos.
- Mapas de temperatura en reactores y sistemas.
- Predicción de gradientes térmicos.
- Balances de energía y calor.
- Distribución de potencial eléctrico y corriente (en procesos electroquímicos).
- Velocidad de corrosión o electrodeposición.
- Nubes de concentración y dispersión de contaminantes.
- Mapas de riesgo (toxicidad, inflamabilidad).
- Parámetros óptimos de operación (T, P, caudales).
- Escenarios comparativos de eficiencia y seguridad.

En las figuras 3.27 y 3.28 es posible observar gráficas generadas por COMSOL MULTIPHYSICS™ con resultados obtenidos de sus productos más notables en el sector químico.



**Figura 3.27. Gráfica generada de la fracción molecular en una reacción con COMSOL MULTIPHYSICS™. Fuente: COMSOL, 2026.**

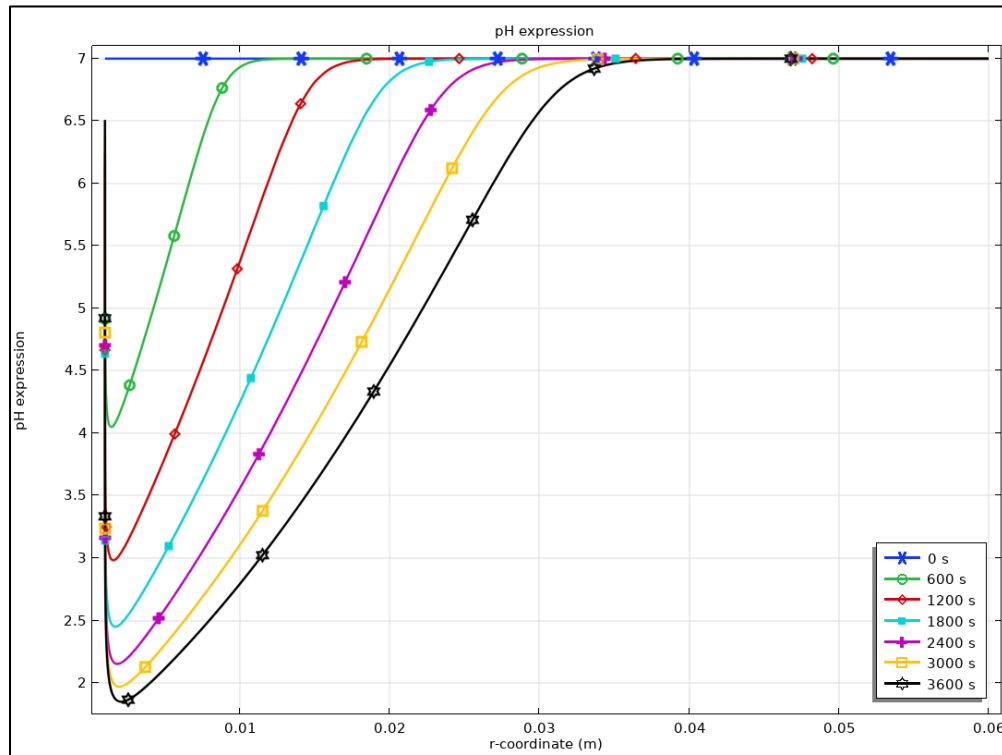


Figura 3.28. Gráfica generada de pH con COMSOL MULTIPHYSICS™. Fuente: COMSOL, 2026.

### Características clave

- Interfaz gráfica "amigable" e interactiva para todas las etapas del proceso de modelado.
- Ilimitadas prestaciones de multifísica.
- Formulación general para un modelado rápido y sencillo de sistemas arbitrarios de PDEs.
- Multifísica multidimensional para modelado simultáneo de sistemas en 1D, 2D y 3D.
- Incorpora herramientas CAD para modelado sólido en 1D, 2D y 3D.
- Permite importar y reparar la geometría de archivos CAD en formato DXF y IGES. En particular, permite la importación de archivos creados en AutoCAD™ y CATIA™.
- Generación automática y adaptativa de mallas, con un control explícito e interactivo sobre su tamaño.
- Extensa biblioteca de modelos que documentan y muestran más de 80 ejemplos resueltos.
- Disponibles los "solvers" más novedosos; entre ellos destacan, resolvedores iterativos para problemas estacionales lineales y no lineales, dependientes del tiempo, y de valores propios.
- Postprocesado interactivo que permite visualizar cualquier función de la solución.
- Integración total con MATLAB™ y sus toolboxes.
- Simulación para analizar diferentes diseños de cuencas de tratamiento de agua en función de parámetros de entrada específicos.

## Módulos de COMSOL MULTIPHYSICS™

### Módulos Químicos de Interés

- Chemical Reaction Engineering Module: Este Módulo sirve para estudiar sistemas reactivos que incluyen transporte de materiales y energía (ver Figura 3.29, 3.30, 3.31 y 3.32).

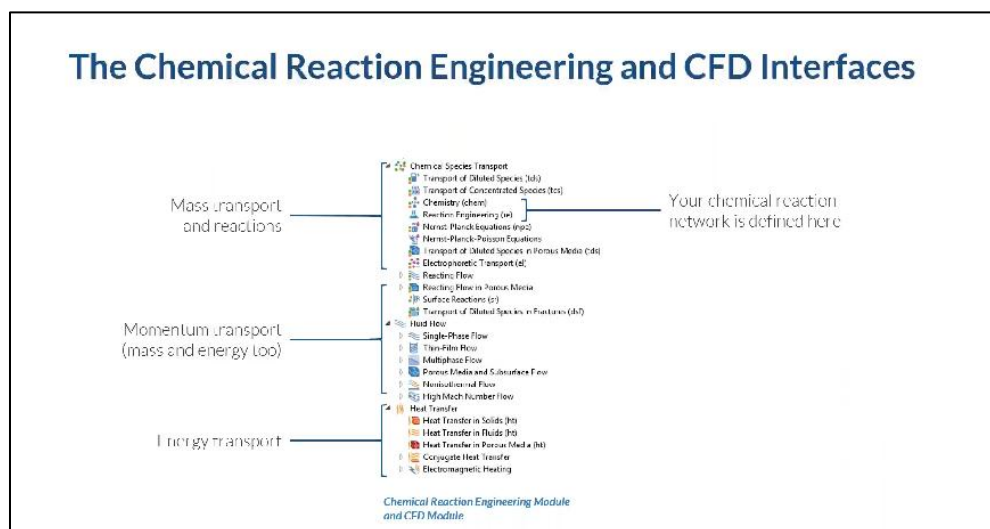


Figura 3.29. La ingeniería de las reacción química e interfaces CFD de COMSOL MULTIPHYSICS™. Fuente: COMSOL, 2026.

**Reaction Orders**

- Mass action law
  - Automatic reaction orders
  - Parsed from formula
  - Orders presented in UI
  - Rate constant unit follows from production rate

2. Parsed reaction orders displayed  
Review for nonelementary reactions!

3. Rate constant unit follows from the production rate.

Figura 3.30. Barra de funciones de reacciones químicas de COMSOL MULTIPHYSICS™. Fuente: COMSOL, 2026.

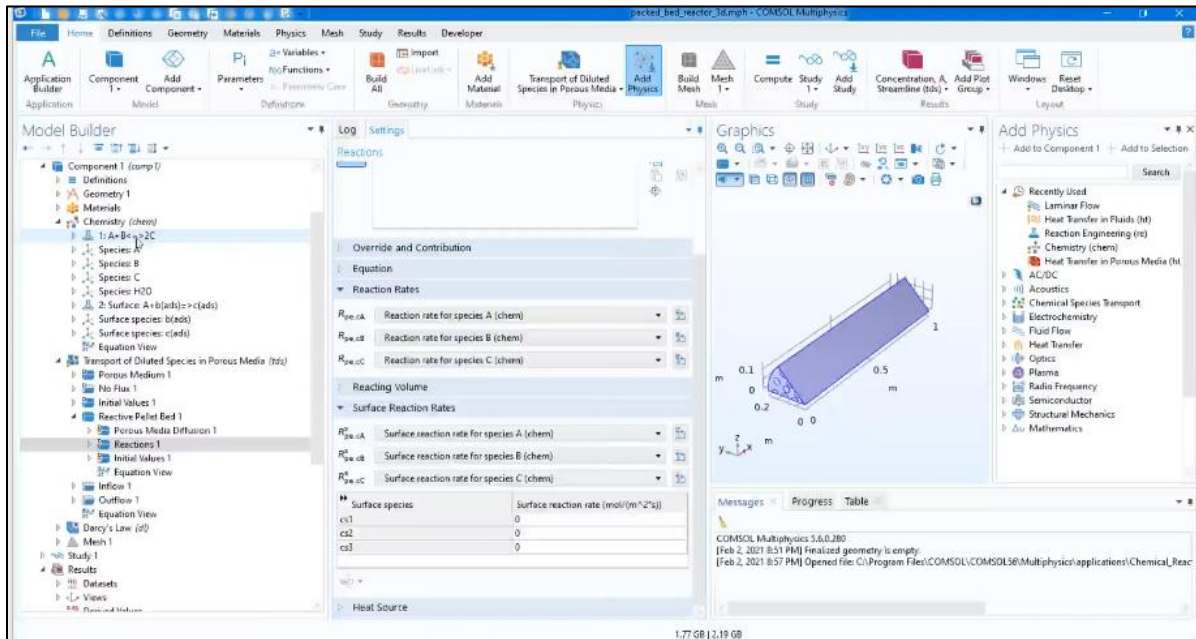


Figura 3.31. Reacciones químicas de COMSOL MULTIPHYSICS™. Fuente: COMSOL, 2026.

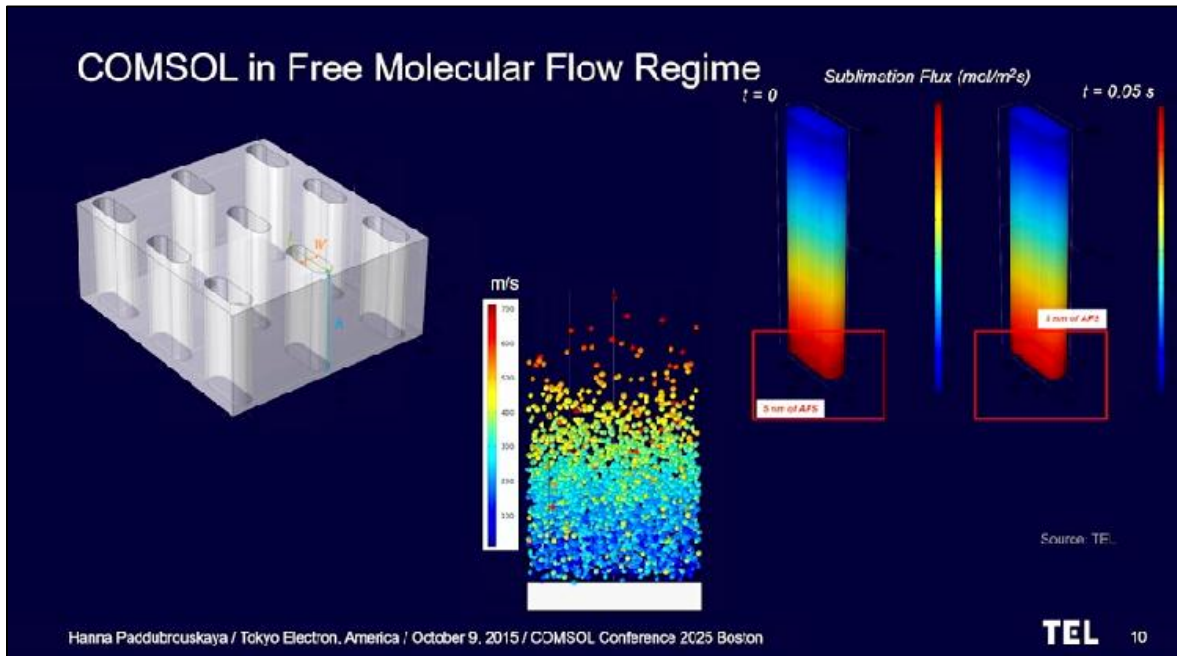
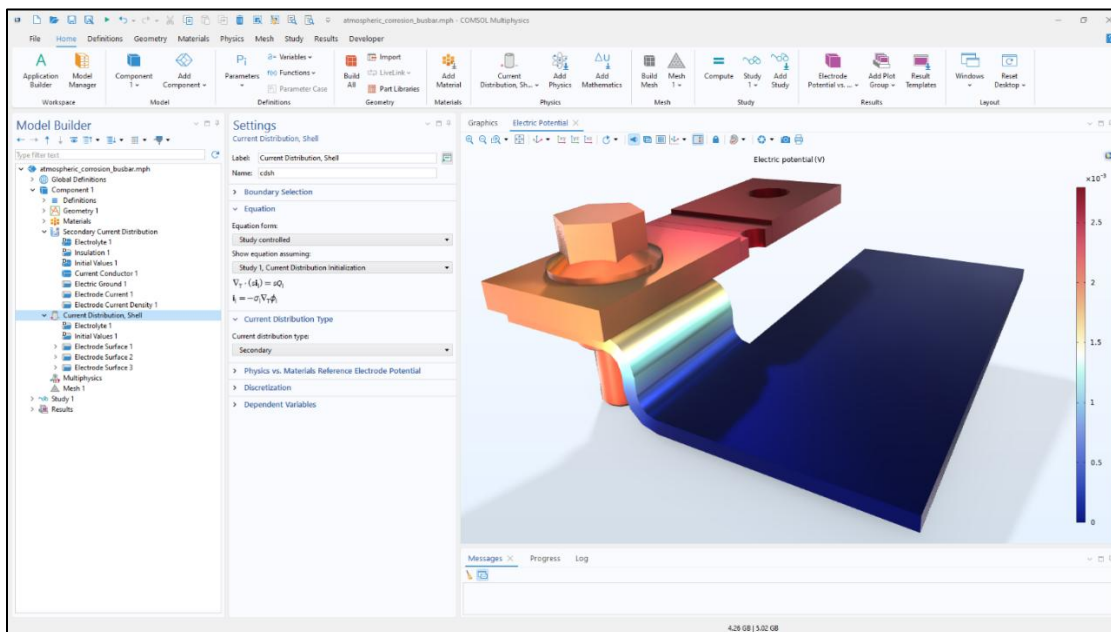


Figura 3.32. Régimen de flujo molecular libre de COMSOL MULTIPHYSICS™. Fuente: COMSOL, 2026.

- Battery Design Module (antes Batteries and Fuel Cells Module): Este módulo es una herramienta especializada diseñada para modelar todo tipo de aplicaciones de baterías y células de combustible.

- Fuel Cell & Electrolyzer Module: Permite obtener una comprensión más profunda de los sistemas de celdas de combustible y electrolizadores, útiles para diseñar y optimizar celdas electroquímicas. Los tipos de sistemas que pueden estudiarse incluyen celdas de combustible de membrana de intercambio de protones (PEMFC), celdas de combustible de intercambio de hidróxido (alcalinas) (AFC), celdas de combustible de carbonato fundido (MCFC) y celdas de combustible de óxido sólido (SOFC), así como correspondientes sistemas de electrolizador de agua. Sin embargo, el módulo admite todo tipo de pilas de combustible y electrolizadores.
- Electrochemistry Module: Modela aplicaciones de electrólisis, electrodiálisis y electroanálisis.
- Electrodeposition Module: Lleva la potencia de COMSOL MULTIPHYSICS™ a los procesos electroquímicos para aplicaciones tan diversas como el plateado de cromo en la industria de automoción, galvanización, electrocoloración, electroplateado decorativo y electrodeposición para fabricación de PCB.
- Corrosion Module: El módulo de corrosión permite a los ingenieros simular la electroquímica de la corrosión y la protección contra la corrosión de estructuras metálicas (ver Figura 3.33).



**Figura 3.33. Simulación de corrosión atmosférica de COMSOL MULTIPHYSICS™. Fuente: COMSOL, 2026.**

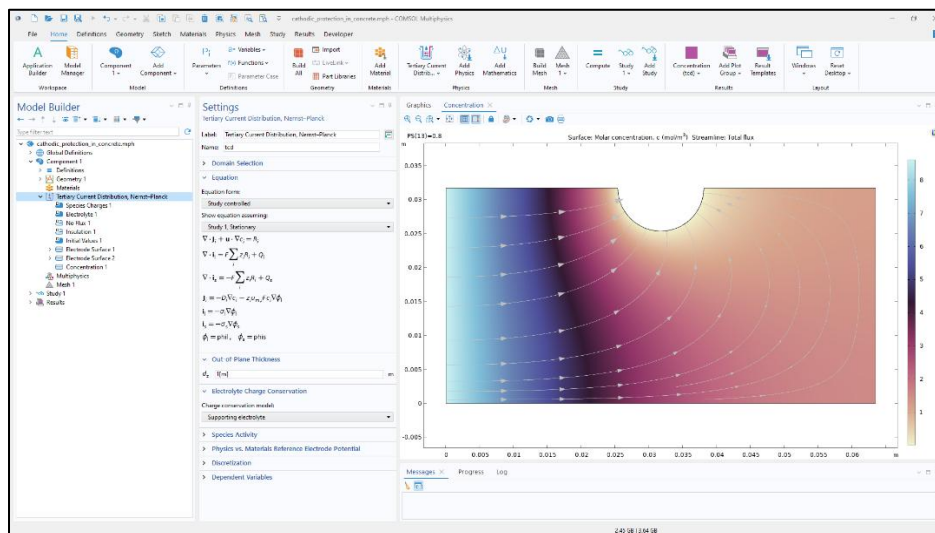
- Polymer Flow Module: Se utiliza para definir y resolver problemas que involucran fluidos no newtonianos con propiedades viscoelásticas, tixotrópicas, de espesamiento por cizalladura o adelgazamiento por cizalladura.
- Microfluidics Module: El módulo de microfluídica aporta herramientas fáciles de usar para el estudio de dispositivos microfluídicos y flujos de gas enrarecido. Entre las aplicaciones

más importantes se incluyen las simulaciones de dispositivos lab-on-a-chip, microfluídica digital, dispositivos electrocinéticos y magnetocinéticos, inkjets, y sistemas de vacío (ver Figura 3.34).



**Figura 3.34. Simulación de corrientes aguas residuales con metales de COMSOL MULTIPHYSICS™. Fuente: COMSOL, 2026.**

- Porous Media Flow Module: Permite modelar transporte de masa, momento y energía en medios porosos (ver Figura 3.35).

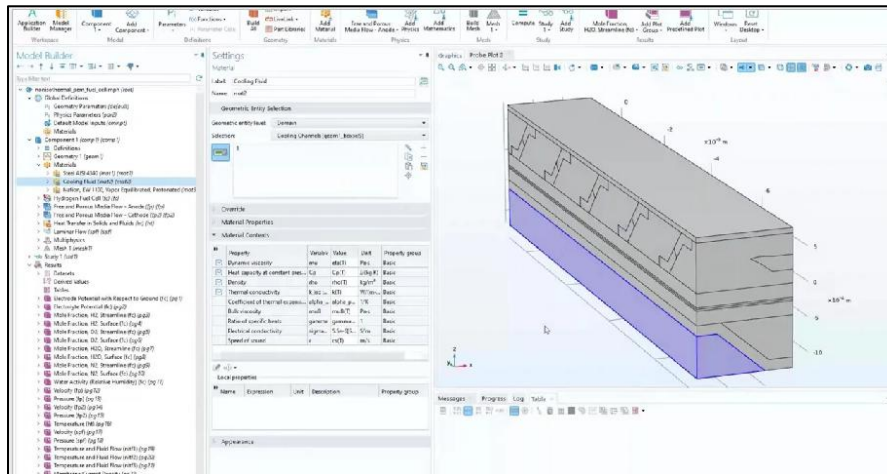


**Figura 3.35. Simulación de la distribución de corriente terciaria de COMSOL MULTIPHYSICS™. Fuente: COMSOL.**

- Pipe Flow Module: Se utiliza para simulaciones de flujo de fluido, transferencia de masa y calor, transitorios hidráulicos y acústica en tuberías y redes de canales. Las simulaciones de flujo de tuberías dan la velocidad, variaciones de presión y temperatura a lo largo de tuberías y canales. El módulo es apropiado para tuberías y canales que tienen longitudes

suficientemente grandes para que el flujo en ellos se pueda considerar que está completamente desarrollado y representado mediante una aproximación 1D.

- Molecular Flow Module: Flujo de gases enrarecidos para sistemas de vacío (ver Figura 3.36).



**Figura 3.36. Simulación en toda la cadena de valor del hidrógeno de COMSOL MULTIPHYSICS™.**  
Fuente: COMSOL, 2026.

- Subsurface Flow Module (antes Earth Science Module): Este módulo consta de un gran número de interfaces de modelado predefinidas y listas para usar para el análisis de flujos subsuperficiales. Estas interfaces permiten la rápida aplicación de las ecuaciones de Richard, ley de Darcy, la extensión de Brinkman de la ley de Darcy para flujos en medios porosos y las ecuaciones de Navier-Stokes para flujo libre. Además, el módulo puede modelar el transporte y reacción de solutos, así como el transporte de calor en medios porosos. La biblioteca de modelos incluye ejemplos que abarcan desde flujos de petróleo y gas en medios porosos a la distribución de trazadores en flujos de acuíferos.
- Metal Processing Module: Este módulo permite modelar transformaciones de fase metalúrgicas en materiales como acero y hierro colado.
- Heat Transfer Module: este módulo resuelve problemas que involucran cualquier combinación de fenómenos de conducción, convección y radiación. Una amplia variedad de interfaces para el modelado permite por ejemplo realizar estudios de radiación superficie a superficie, flujo no isotérmico, transferencia de calor en tejidos vivos y transferencia de calor en capas finas y corazas. Los detallados modelos ilustran ejemplos para diversas áreas de aplicación como enfriamiento electrónico y sistemas de potencia, procesado y producción térmica o tecnología médica y bioingeniería.

### Aplicaciones principales

- Reacciones químicas y cinética: Modelado de cinéticas de reacción, incluyendo múltiples reacciones acopladas y reacciones en fase gaseosa, líquida o sólida y evaluación de rendimiento y selectividad de productos bajo distintas condiciones de operación.

- Transporte de masa y flujo: Modela difusión, convección y transporte de especies químicas. Generación de simulaciones de mezclado y turbulencia en reactores y mezcladores y permite analizar gradientes de concentración y optimizar la geometría de equipos.
- Transferencia de calor: Integración de reacción química y transferencia de calor para evitar hotspots y garantizar seguridad, así como la optimización de sistemas de enfriamiento o calentamiento en reactores químicos.
- Electroquímica y procesos avanzados: Simulación de celdas electrolíticas, baterías químicas, corrosión y electrodeposición, y modelado de procesos de separación, como electrodiálisis, membranas y difusión selectiva.
- Multiphysics en química: COMSOL™ permite acoplar fenómenos físicos: Reacciones químicas + flujo de fluidos + transferencia de calor + electromagnetismo. Esto permite simular procesos industriales complejos de manera realista.
- Optimización y diseño de procesos: Los ingenieros químicos pueden usar COMSOL™ para probar múltiples escenarios operativos, evaluar seguridad, eficiencia y escalabilidad de procesos. Permite reducir prototipos físicos y costos de operación.

### Estudios recientes en 2025 según la COMSOL en su página oficial

- Simulación de microbombas sin válvulas
- Modelado multifísico en investigación del cáncer.
- COMSOL MULTIPHYSICS™ para diseñar sensores piezoeléctricos.
- Análisis de sensibilidad en COMSOL MULTIPHYSICS™.
- COMSOL MULTIPHYSICS™ ayuda a predecir el comportamiento térmico de la Luna.
- Desarrollo de tecnologías LOHC para el transporte de hidrógeno utilizando COMSOL MULTIPHYSICS™.
- Estudio térmico de hormigones sostenibles utilizando COMSOL MULTIPHYSICS™.

En la Figura 3.37 es posible observar logros importantes obtenidos por empresas internacionales como Samsung, Volkswagen, Toyota, entre otras.



**Figura 3.37. Antecedentes de la industria internacional con COMSOL MULTIPHYSICS™. Fuente: COMSOL, 2026.**

### 3.8 ECOLEGO

ECOLEGO™ es un software especializado en la creación de modelos dinámicos con simulaciones tanto deterministas como probabilísticas, ideal para evaluar riesgos en sistemas complejos que evolucionan en el tiempo. ECOLEGO™ puede utilizarse para realizar evaluaciones de riesgos de sistemas dinámicos complejos. ECOLEGO™ cuenta con bases de datos especializadas y otros complementos diseñados para el campo de la evaluación de riesgos radiológicos (ECOLEGO, 2003). En la Figura 3.38 es posible observar el logo del software.



*Figura 3.38. Logo de ECOLEGO™. Fuente: G2, 2018.*

#### **Características clave**

- Creación de modelos mediante matrices de interacción.
- Compatibilidad con simulaciones probabilísticas mediante muestreo de Monte Carlo o Hipercubo Latino. Base de datos integrada de parámetros y radionúclidos.
- Conexión a una base de datos externa de parámetros para compartir y gestionar parámetros de proyectos con garantía de calidad.
- Análisis de sensibilidad de parámetros.
- Genera informes completos que se pueden guardar en diversos formatos. Posibilidad de crear gráficos y tablas con los resultados de la simulación.
- Acceso a funciones, solucionadores numéricos, herramientas y capacidades gráficas de MATLAB™/Simulink™. Posibilidad de llamar a funciones creadas por el usuario en MATLAB™ y a modelos de Simulink™ diseñados por el usuario durante la simulación.
- Exportación e importación de valores de parámetros y resultados a/desde Microsoft Excel.

ECOLEGO™ es una herramienta de software para el desarrollo de modelos matemáticos de sistemas y procesos dinámicos (ver Figura 3.39). Los modelos pueden consistir en expresiones analíticas, sistemas de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO) o una combinación de ambos. Además, incluye solucionadores numéricos de vanguardia para la solución numérica de sistemas de EDO (ver Figura 3.40 y 3.41). Incorpora un motor para la propagación probabilística de la incertidumbre de los parámetros que permite realizar análisis de incertidumbre y sensibilidad (ECOLEGO, 2003).



Figura 3.39. Interfaz de ECOLEGO™. Fuente: Ávila, 2013.

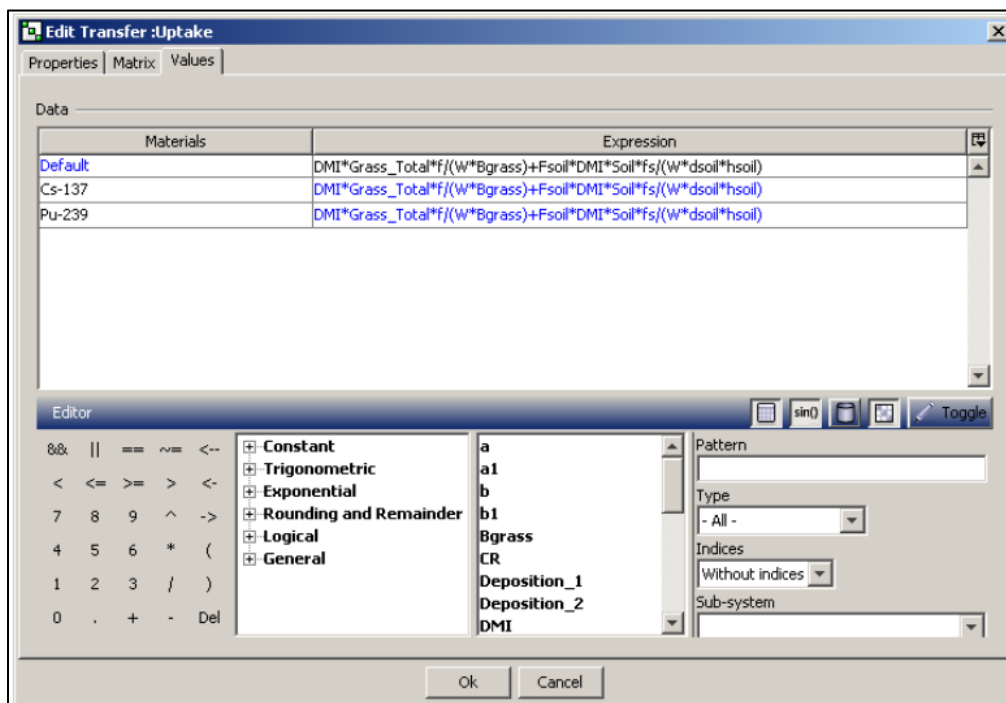


Figura 3.40. Herramientas de cálculo de ECOLEGO™. Fuente: Ávila, 2013.

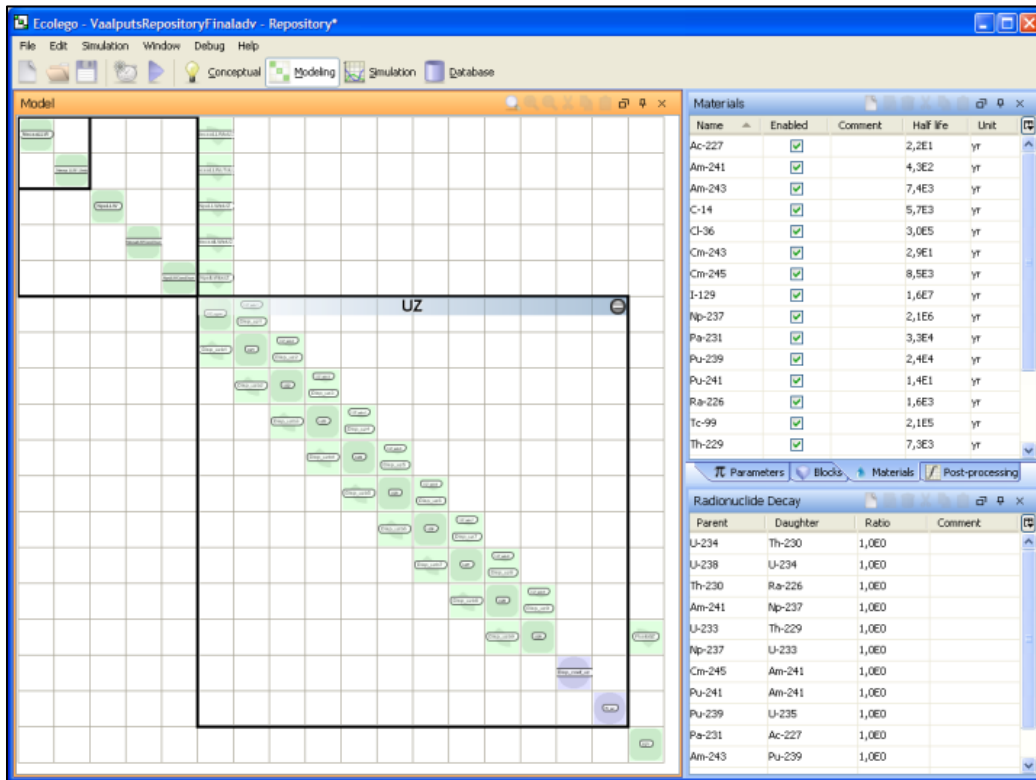


Figura 3.41. Modelos jerárquicos de ECOLEGO™. Fuente: Ávila, 2013.

### Cajas de herramientas EDO – ODE Toolbox

La licencia comercial y académica de ECOLEGO™ incluye la caja de herramientas ODE, y las cajas de herramientas adicionales se pueden adquirir por un costo adicional. A continuación, se presenta una lista y breves descripciones de las cajas de herramientas:

- **Caja de herramientas ODE:** La caja de herramientas ODE permite al usuario crear y simular modelos compartimentados en ECOLEGO™. Admite sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias lineales y no lineales.

La caja de herramientas de ODE incluye las siguientes funciones:

1. El componente de compartimento representa una variable o estado dependiente.
  2. El componente de transferencia modela flujos entre compartimentos. Las transferencias pueden ser lineales, no lineales o discretas.
  3. El subsistema de transporte permite aproximar ecuaciones diferenciales parciales en una dimensión.
  4. Una extensa biblioteca de solucionadores numéricos.
  5. Simulaciones por lotes.
- **Caja de herramientas de análisis de sensibilidad:** La caja de herramientas de análisis de sensibilidad de Eikos admite métodos de análisis de sensibilidad de vanguardia (tanto locales como globales). El análisis de sensibilidad se utiliza para evaluar la influencia de los parámetros del modelo en sus predicciones.

- **Caja de herramientas de base de datos de parámetros:** Esta caja de herramientas proporciona una conexión entre ECOLEGO™ y su base de datos de parámetros.
- **Caja de herramientas de radionúclidos:** La caja de herramientas de radionúclidos es un complemento de ECOLEGO™ para el modelado de radionúclidos. Esta caja de herramientas incluye una base de datos que contiene todos los isótopos de núclidos, sus constantes de desintegración y energías. También contiene las relaciones padre-hija entre un radionúclido y sus productos de desintegración.

### **Aplicaciones relevantes en química y ambiental**

- **Modelado compartimental dinámico:** Permite representar flujo y transformación de sustancias entre compartimentos (p. ej., suelo, agua, aire), con sistemas de ecuaciones diferenciales, lineales o no lineales.
- **Análisis de incertidumbre y riesgo:** Incluye herramientas como Monte Carlo y muestreo Latin Hypercube, integración de funciones de densidad de probabilidad y análisis de sensibilidad (Sobol, EFAST, Morris, etc.).
- **Manejo avanzado de datos y documentación:** Genera informes automáticos (PDF, HTML, Word) con matrices de interacción, parámetros, ecuaciones, gráficas y tablas; además cuenta con chequeo de unidades, control de versiones y bibliotecas de modelos reutilizables (módulos).
- **Integración de bases de datos especializadas:** Incluye, por ejemplo, información completa sobre radionúclidos, sus propiedades y cadenas de decaimiento —que, aunque más típica de radioquímica, abre paso a extensiones de datos ambientales/químicos.

### **Aplicaciones relevantes en la industria minera**

ECOLEGO™ se ha aplicado al sector minero de Suecia y Noruega en el pasado, pero según las necesidades específicas de cada cliente/contrato. El cliente tradicional en este sector es el usuario de ECOLEGO™ para las actividades que se implementarán en la minería de uranio (y otros elementos) y en yacimientos antiguos. Debido a que en estas actividades existe la necesidad y el potencial de realizar evaluaciones de seguridad, riesgo e impacto ambiental en relación con los radionucleidos en industrias, como la minería de cobre y otras minas no relacionadas con el uranio (ECOLEGO, 2003).

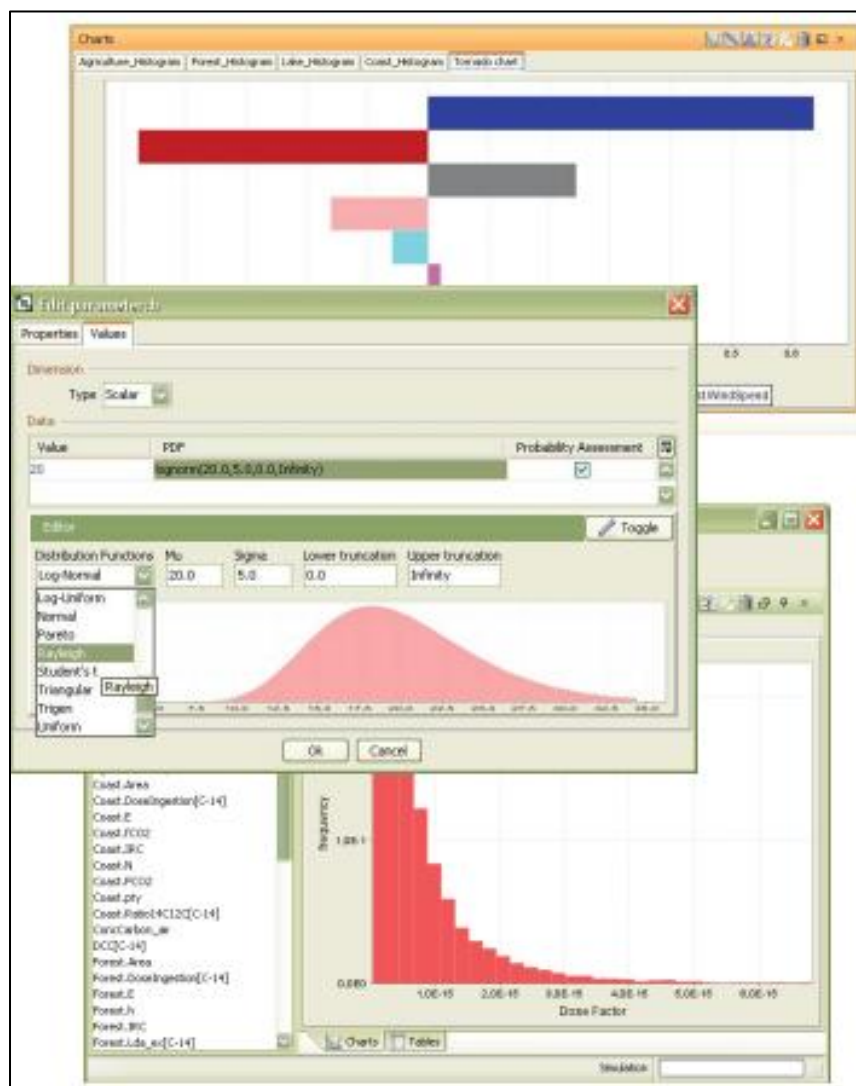
Dentro de sus resultados más importantes en la industria minera se tiene:

- Balance hídrico.
- Dispersión de sustancias químicas en el medio ambiente.

### **Resultados de ECOLEGO™**

Como se muestra, ECOLEGO™ ofrece múltiples resultados para sus análisis y modelos numéricos realizados (ver Figura 3.42 y 3.43), entre sus principales resultados se destaca:

- Trayectorias temporales de variables clave: Valores numéricos sobre la evolución de concentraciones, fragmentaciones químicas o tasas de flujo en cada compartimento.
- Distribuciones estadísticas bajo incertidumbre.
- Resultados probabilísticos: Rangos de comportamiento (percentiles, medias, desviaciones) según diferentes escenarios de entrada.
- Análisis de sensibilidad: Gráficos tipo “tornado”, scatter plots, medidas de sensibilidad global que muestran la influencia de cada parámetro en la salida del modelo.
- Informes completos y estructurados: Documentos en formatos PDF, HTML o Word que incluyen modelos, resultados gráficos, tablas de parámetros, ecuaciones y comentarios del sistema.
- Modelos reutilizables y exportables: Módulos parametrizados que puedes compartir con otros usuarios vía ECOLEGO™ Player, sin necesidad de licencia completa.



**Figura 3.42. Simulaciones de ECOLEGO™. Fuente: Ávila, 2013.**

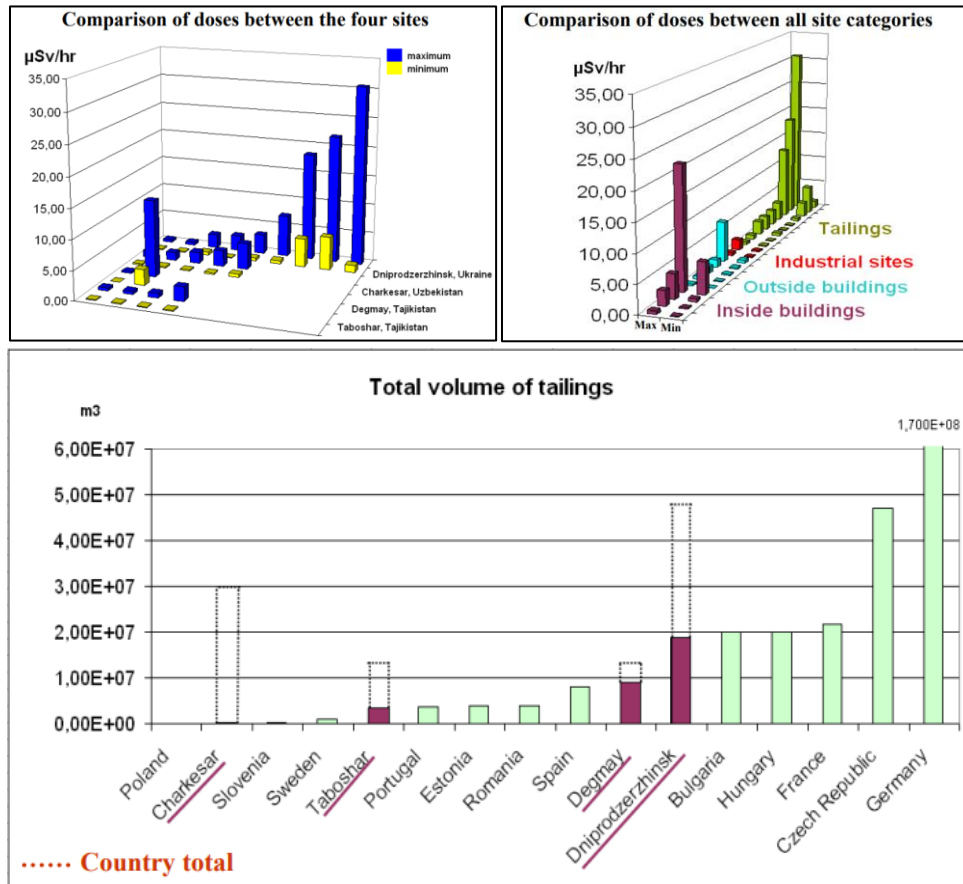


Figura 3.43. Gráficas de ECOLEGO™. Fuente: Ávila, 2013.

### 3.9 SIMULADOR DE PROPAGACIÓN Y ACELERACIÓN DE FLAMA (POR SUS SIGLAS EN INGLÉS FLACS™)

Es un software de simulación tridimensional especializado en modelar explosiones, dispersiones de gases y seguridad en procesos industriales. Lo desarrolla la empresa Gexcon y se basa en Dinámica de Fluidos Computacional (CFD). En la Figura 3.44 es posible observar el logo del software.

FLACS™ es una herramienta CFD líder diseñada para profesionales de la seguridad para predecir y mitigar las consecuencias de incendios, explosiones y dispersión de gases tóxicos. Al aprovechar el modelado 3D detallado, FLACS™ ayuda a los ingenieros y a los tomadores de decisiones a identificar riesgos, optimizar los diseños de las instalaciones y desarrollar estrategias de seguridad efectivas en entornos industriales complejos.

FLACS™ genera una amplia gama de resultados, como concentraciones de gases, niveles de sobrepresión, radiación térmica y caudales. Estos resultados pueden visualizarse interactivamente con Flowvis o integrarse en flujos de trabajo más amplios mediante la API de Python, lo que permite a los ingenieros comparar escenarios, explorar datos y desarrollar estrategias de seguridad optimizadas (Gexcon, 2025).



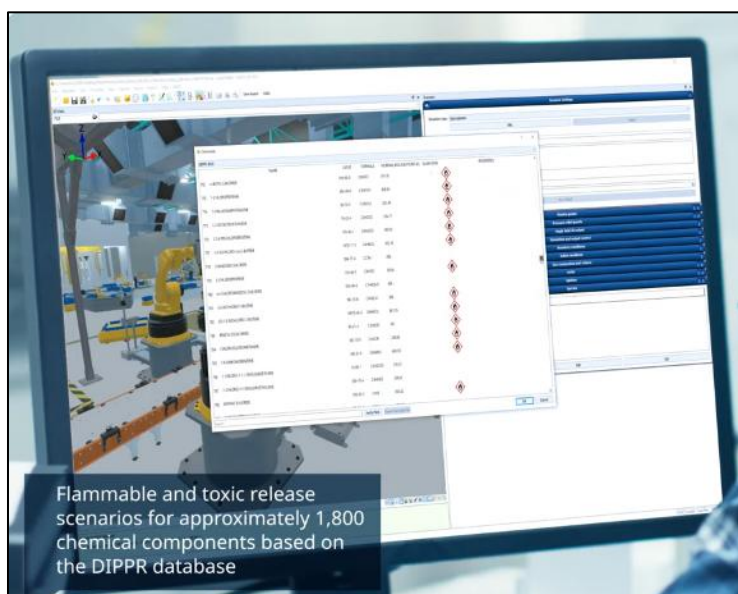
**Figura 3.44. Logo de FLACS™. Fuente: Gexcon, 2025.**

## **Funciones**

- Optimiza la configuración de escenarios con CASD.
- Importación y limpieza sencillas de geometrías complejas.
- Herramientas flexibles para la definición de escenarios de peligro.
- Funcionalidad de cuadrícula automática para una creación eficiente de mallas.
- Integración perfecta con los módulos FLACS™.
- Visualización interactiva de resultados con FLOWVIS.
- Visualización dinámica en 2D y 3D de los resultados de simulación.
- Exploración interactiva de resultados como concentraciones de gases y niveles de sobrepresión.
- Opciones de exportación para generar informes, imágenes y vídeos de alta calidad.
- Compatible con la API de Python para el análisis automatizado de datos.
- Preprocesamiento y posprocesamiento mejorados para el modelado basado en riesgos.
- Configuración paramétrica para escenarios de ventilación, dispersión, incendio y explosión.
- Integración con modelos de ignición como UKOAA y OLF.
- Visualización de contornos de riesgo en 3D para una comunicación eficaz con las partes interesadas.
- Funciona con CASD y FLOWVIS para optimizar los flujos de trabajo.
- Gestión de simulación en la nube escalable y rentable.
- Recursos de computación de alto rendimiento (HPC) escalables para grandes simulaciones.
- Integración con CASD para la preparación de escenarios y FLOWVIS para la visualización.
- Carga segura de datos y recuperación de resultados mediante redes cifradas.
- Reduce la necesidad de costosos recursos de TI internos.

## Características clave

- Interfaz fácil de usar: Diseñado para la simplicidad, permitiendo a los profesionales de la seguridad resolver problemas de manera eficiente sin curvas de aprendizaje pronunciadas.
- Resultados validados: Con la confianza de expertos a nivel mundial, con resultados alineados con datos experimentales y del mundo real.
- Modelado basado en escenarios: Simular diversos escenarios de peligro para evaluar riesgos, explorar situaciones hipotéticas y desarrollar estrategias de mitigación optimizadas (ver Figura 3.45).
- Preparados para la transición energética: Diseñado para abordar los desafíos de seguridad emergentes en los sistemas de hidrógeno, amoníaco, captura de carbono y energía renovable.
- Modelado preciso para geometrías 3D complejas: FLACS™ destaca en la simulación del comportamiento de riesgos en entornos industriales complejos, incluyendo espacios confinados, terrenos irregulares y diseños con obstáculos. Al considerar los efectos geométricos del mundo real, FLACS™ proporciona información práctica para guiar el diseño de instalaciones y las estrategias de mitigación de riesgos.

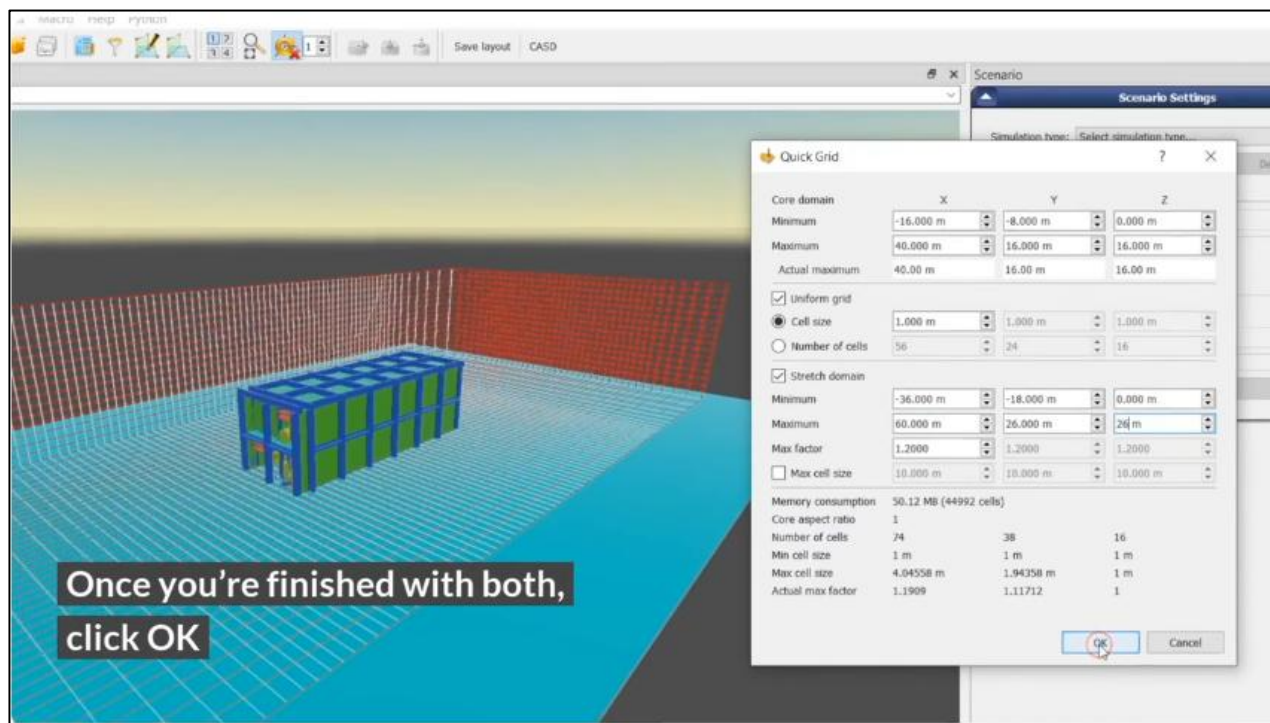


**Figura 3.45. Catálogo de escenarios y herramientas de explosiones de FLACS™. Fuente: Gexcon, 2022.**

FLACS™ genera una amplia gama de resultados, como concentraciones de gases, niveles de sobrepresión, radiación térmica y caudales. Estos resultados pueden visualizarse interactivamente con Flowvis o integrarse en flujos de trabajo más amplios mediante la API de Python, lo que permite a los ingenieros comparar escenarios, explorar datos y desarrollar estrategias de seguridad optimizadas.

## Principales aplicaciones

- Explosiones de gases: Simula la aceleración de llamas y explosiones en espacios confinados o abiertos. Además de evaluar sobrepresiones, velocidad de deflagración/detonación y efectos en estructuras.
- Dispersiones de gases y fugas: Modela cómo se dispersan gases tóxicos, inflamables o asfixiantes en el aire. Así como considera efectos de viento, obstáculos, temperatura y densidad de gas.
- Incendios industriales: Predicción del comportamiento de incendios de piscina (pool fires), chorros (jet fires) y llamas. También realiza la evaluación de radiación térmica sobre equipos y personas.
- Seguridad en instalaciones químicas y de energía: Diseño de refinerías, plantas químicas, tanques de almacenamiento, gasoductos y plataformas offshore. Además de identificar zonas de riesgo para planificación de seguridad y evacuación.
- Análisis de accidentes mayores: Herramienta para cumplir normativas de seguridad en procesos peligrosos (ver Figura 3.46).



**Figura 3.46. Simulación 3D de FLACS™. Fuente: Gexcon, 2022.**

FLACS™ proporciona visualizaciones 3D realistas de escenarios de peligro, lo que le permite demostrar claramente los riesgos a las partes interesadas y a los organismos reguladores. Con imágenes detalladas, puede generar confianza, agilizar la toma de decisiones y coordinar a todas las partes hacia una estrategia de seguridad común (ver Figura 3.47).



**Figura 3.47. Simulación 3D de una inundación de FLACS™. Fuente: Gexcon, 2022.**

## **Módulos de FLACS™**

### **Resultados detallados para tomar decisiones más seguras e inteligentes**

FLACS™ genera una amplia gama de resultados, como concentraciones de gases, niveles de sobrepresión, radiación térmica y caudales. Estos resultados pueden visualizarse interactivamente con Flowvis o integrarse en flujos de trabajo más amplios mediante la API de Python, lo que permite a los ingenieros comparar escenarios, explorar datos y desarrollar estrategias de seguridad optimizadas (Gexcon, 2025).

### **Modelado preciso de ventilación y dispersión de gases**

FLACS-Dispersión™ simula la ventilación natural y forzada, las fugas y la dispersión de sustancias peligrosas. Proporciona información crucial para optimizar los tiempos de detección, mejorar la ventilación y gestionar las fugas de gases en espacios confinados o abiertos (ver Figura 3.48).

Aplicable a:

- Fugas de amoníaco en sistemas de refrigeración de alimentos.
- Evaporación y dispersión de piscinas de GNL en instalaciones industriales.
- Formación de nubes de gas bajo condiciones de ventilación variables en plantas de petróleo y gas.

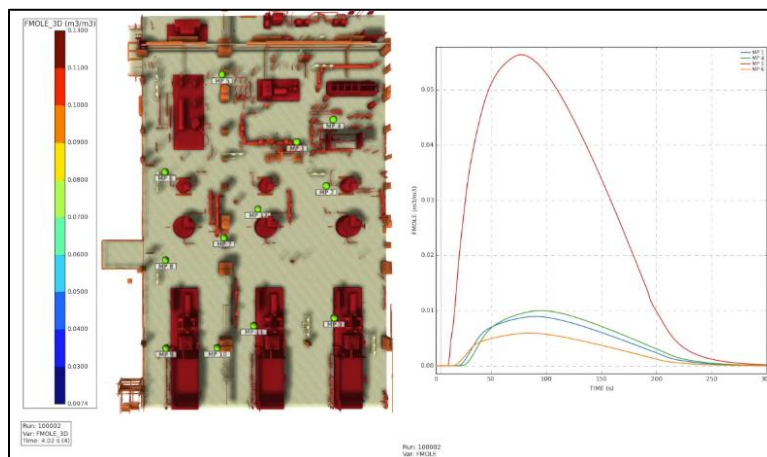


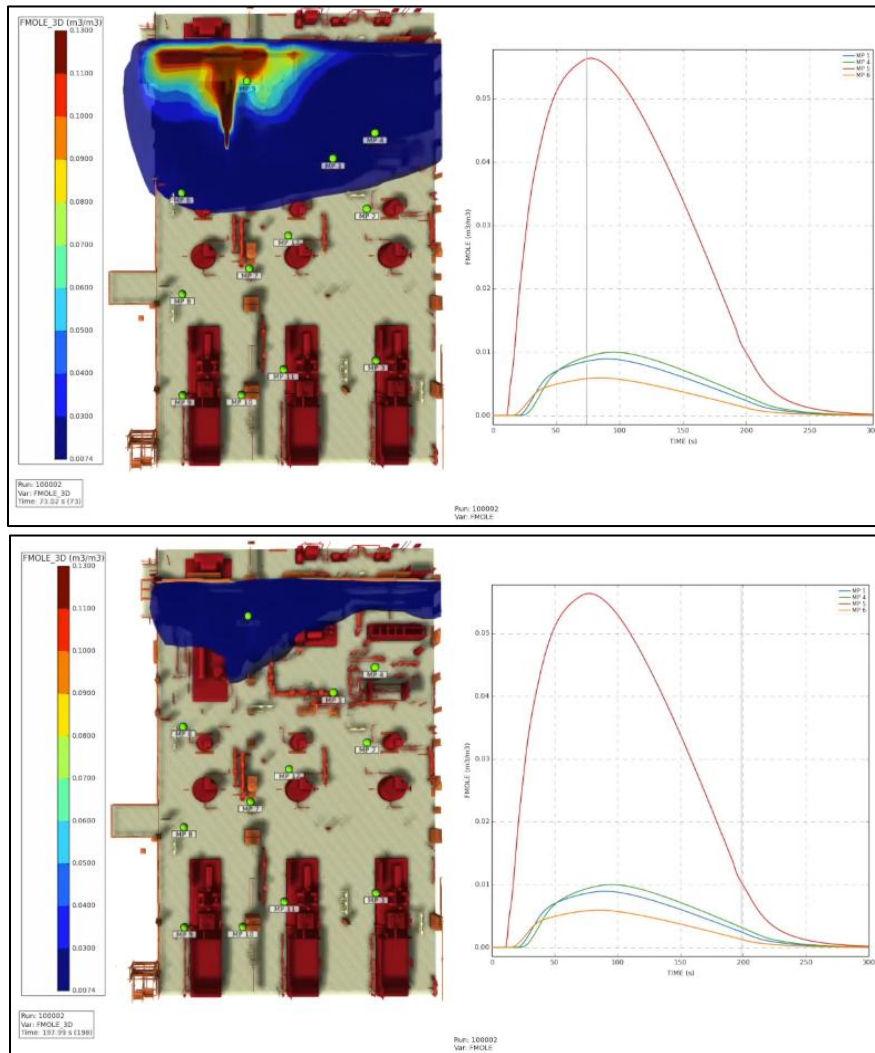
**Figura 3.48. Simulación 3D de una fuga de gas de FLACS™. Fuente: Gexcon, 2022.**

### Simulación de Explosiones de Nubes de Vapor

FLACS-GasEx™ modela explosiones de nubes de vapor (VCE) con precisión, considerando factores de congestión, confinamiento y mitigación. Es utilizado para evaluar las consecuencias de las explosiones, respaldar las evaluaciones de riesgos y perfeccionar el diseño de las instalaciones (ver Figura 3.49). Aplicable a:

- Evaluaciones estructurales y optimización del diseño.
- Análisis de explosiones de mezclas de hidrógeno y gas natural.
- Evaluación del riesgo de explosión de gas en instalaciones de producción química.



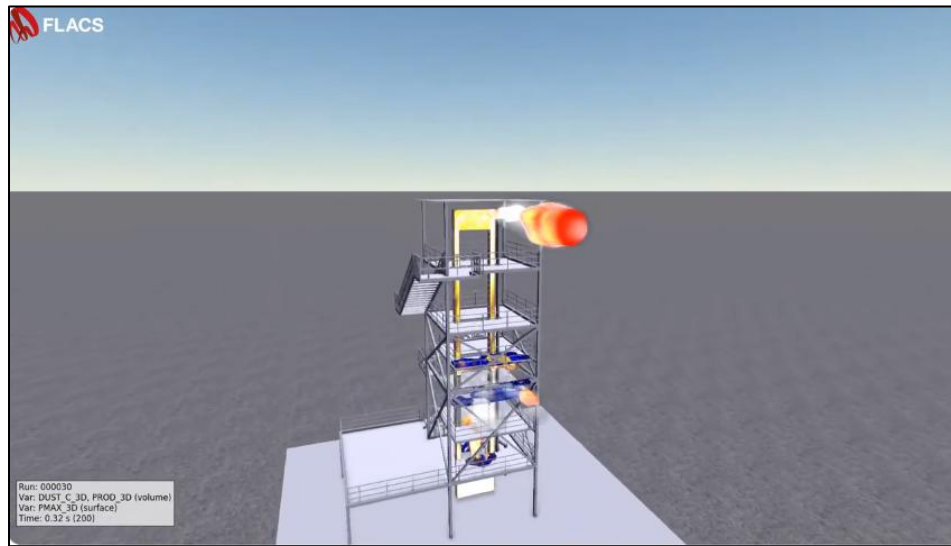


**Figura 3.49. Simulación de una fuga de gas con gráfica de FLACS™. Fuente: Gexcon, 2022.**

### Modelado de incendios de chorro (jet fire) y charco (pool fire) para un diseño más seguro

FLACS-Fire™ evalúa los riesgos de incendio industrial, proporcionando información para el diseño de protección pasiva contra incendios (PFP) y la comprensión del comportamiento de la combustión en entornos complejos (ver Figura 3.50). Se integra a la perfección con otros módulos de FLACS™ para realizar evaluaciones exhaustivas. Aplicable a:

- Incendios de chorro con flujos de momento alto y bajo.
- Escenarios de incendios de charco y modelos de llama sólida de cribado rápido.
- Análisis de la radiación térmica en entornos industriales congestionados.



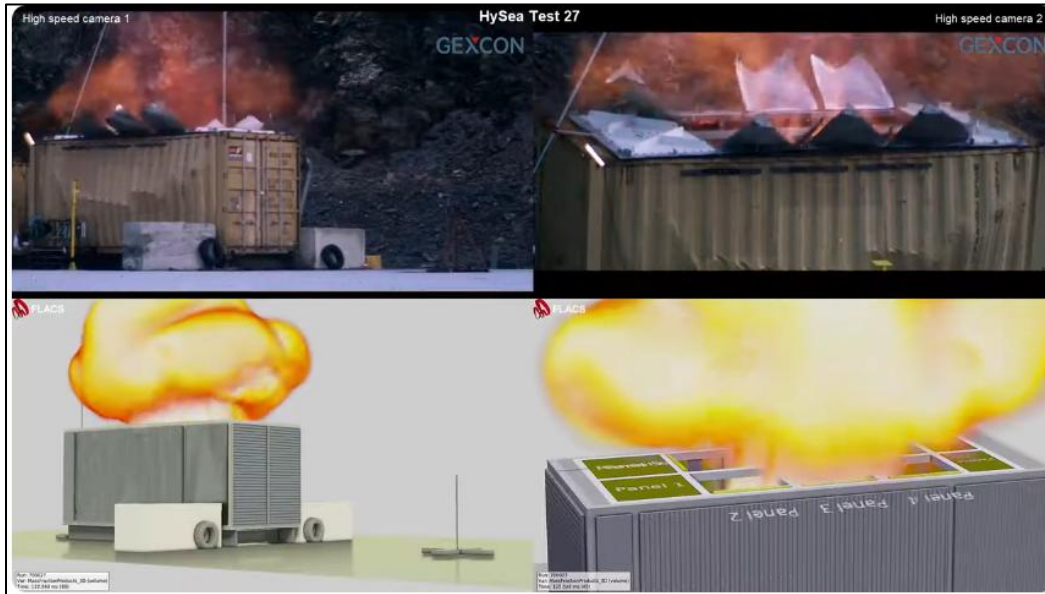
**Figura 3.50. Simulación de un incendio a chorro (jet fire) de FLACS™. Fuente: Gexcon, 2019.**

### Solución rentable para el modelado de hidrógeno

FLACS-Hidrógeno™ integra las funcionalidades de FLACS-Dispersión™, FLACS-GasEx™ y FLACS-Fuego™ en una solución específica y asequible para escenarios específicos de hidrógeno. Los usuarios con acceso completo al módulo también pueden modelar hidrógeno, mientras que FLACS-Hidrógeno™ ofrece una opción rentable para proyectos centrados en el hidrógeno (ver Figura 3.51). Aplicable a:

- Dispersión de hidrógeno desde almacenamiento comprimido o criogénico.
- Propagación de la llama y aumento de presión en explosiones de hidrógeno.
- Análisis de ondas explosivas para instalaciones de almacenamiento de hidrógeno.





**Figura 3.51. Simulación de una deflagración de hidrógeno de FLACS™. Fuente: Gexcon, 2019.**

### Modelado de explosiones de polvo industrial

FLACS-DustEx™ es la única herramienta de CFD para simular explosiones de polvo industrial. Ayuda a optimizar estrategias de mitigación como el venteo, la supresión y las barreras antiexplosiones para una amplia gama de materiales (ver Figura 3.52). Aplicable a:

- Explosiones de polvo de polvos agrícolas o farmacéuticos.
- Apilamiento a presión en sistemas de recipientes interconectados.
- Análisis de explosiones secundarias a partir del levantamiento de polvo por ondas de choque.



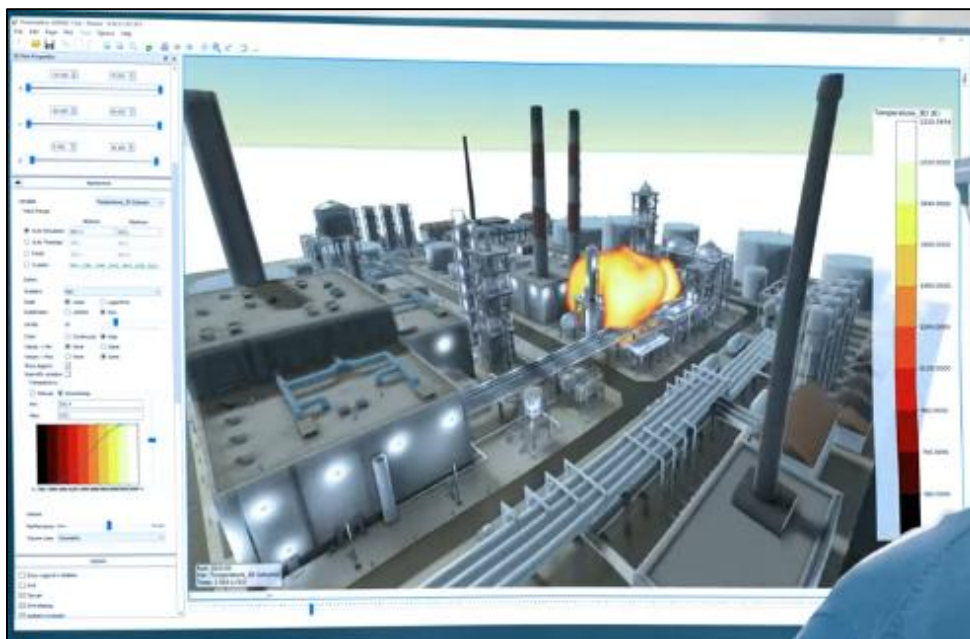


**Figura 3.52. Simulación de una explosión de polvo de FLACS™. Fuente: Gexcon, 2017.**

### Simulación de ondas explosivas de explosivos

FLACS-Blast™ modela con precisión la propagación de ondas explosivas de explosivos en fase condensada, lo que facilita aplicaciones de seguridad y diseño de protección (ver Figura 3.53 y 3.54). Aplicable a:

- Propagación de ondas explosivas de fuentes de TNT o RDX
- Análisis de riesgos para infraestructuras de alta seguridad



**Figura 3.53. Interfaz de una explosión de FLACS™. Fuente: Gexcon, 2022.**

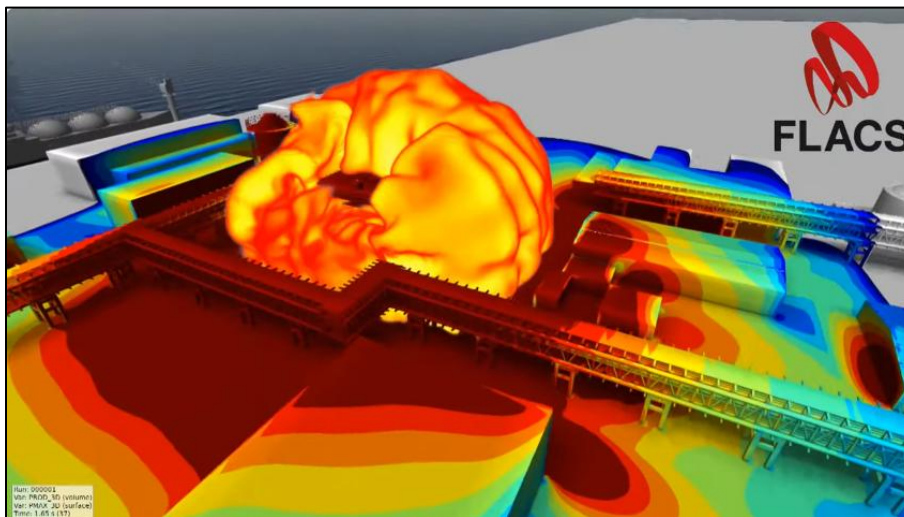
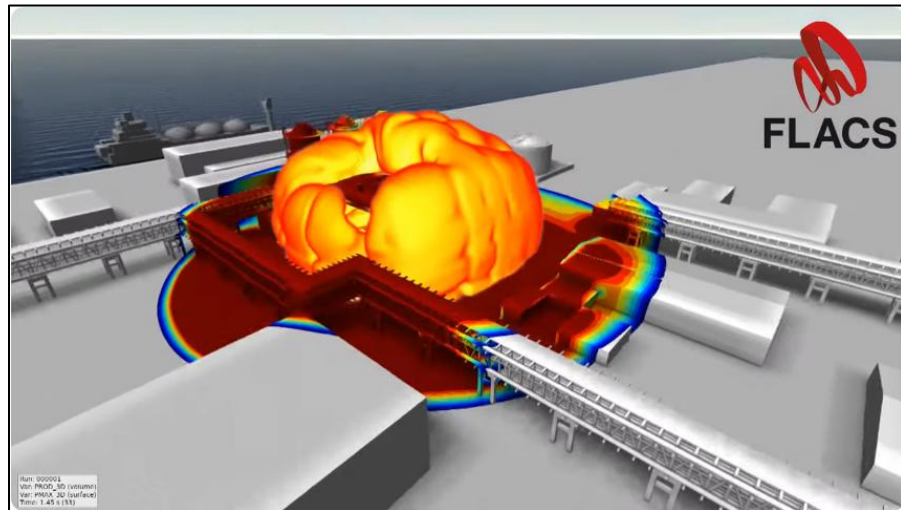
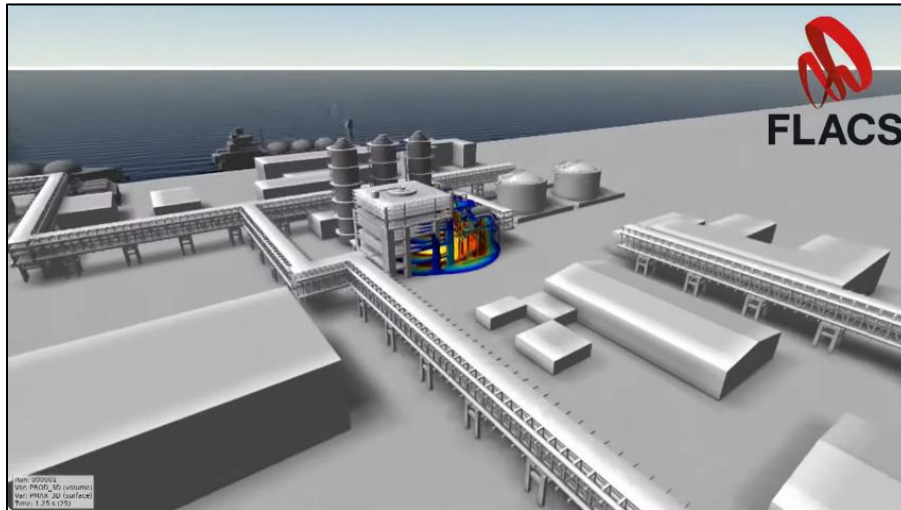


Figura 3.54. Simulación de una explosión de FLACS™. Fuente: Gexcon, 2019.

## CAPÍTULO 4. RESULTADOS COMPARATIVOS DE LOS SOFTWARES.

### 4.1 Examinación de los softwares de análisis de riesgos químicos

En este apartado se presenta un análisis técnico de los principales softwares evaluados en el presente trabajo, con el fin de examinar sus alcances, limitaciones y aplicaciones dentro del análisis de riesgos químicos. La examinación se realiza mediante la agrupación de los programas de cómputo según su enfoque principal, lo que permite una evaluación clara y estructurada de sus capacidades y su utilidad en distintos contextos industriales y académicos.

#### 4.11 Softwares orientados al análisis de consecuencias y respuesta a emergencias

Dentro de esta categoría se incluyen PHAST™ y ALOHA™, programas diseñados específicamente para modelar escenarios de liberación accidental de sustancias peligrosas. PHAST™ se distingue por su capacidad para realizar un análisis integral de consecuencias, desde la modelación del término fuente hasta la evaluación de efectos tóxicos, incendios y explosiones. Su enfoque probabilístico permite cuantificar el riesgo mediante la combinación de la probabilidad de ocurrencia y la severidad de las consecuencias, lo que lo convierte en una herramienta fundamental para estudios HAZOP, HAZID y análisis cuantitativos de riesgo. No obstante, su alto costo de licencia y su complejidad técnica limitan su uso principalmente a grandes industrias y consultoras especializadas.

Por otro lado, ALOHA™ ofrece un enfoque más simplificado y accesible, orientado principalmente a la respuesta inmediata ante emergencias y a la capacitación de brigadas de protección civil. Si bien presenta limitaciones en escenarios complejos, como instalaciones altamente congestionadas o condiciones atmosféricas variables, su facilidad de uso y su capacidad para generar zonas de amenaza de forma visual lo convierten en una herramienta efectiva para la toma rápida de decisiones en situaciones críticas.

En un estudio realizado por Saturnino (2024) para su tesis de maestría, se llevó a cabo un análisis comparativo entre los softwares PHAST™, HyRAM™ y ALOHA™, enfocado en la modelización de consecuencias accidentales en sistemas de almacenamiento de hidrógeno. El objetivo principal de la investigación fue evaluar la precisión y las capacidades de estas herramientas para simular la dispersión de gases y la radiación térmica por incendios de chorro (*jet fires*) provenientes de fugas en tanques presurizados, validando los resultados obtenidos frente a datos experimentales reales de diversos estudios.

Los resultados de dicha investigación evidenciaron limitaciones significativas en el uso de ALOHA™ para este tipo de escenarios. El autor destacó que esta herramienta no pudo generar resultados válidos para la mayoría de los experimentos de pequeña y mediana escala, debido a que el software no visualiza zonas de amenaza para distancias inferiores a 10 metros. Además, se identificó que ALOHA™ está restringido a la simulación de *jet fires* exclusivamente verticales, lo que impide modelar liberaciones horizontales, y emplea modelos de dispersión (Gaussianos o

de gas denso) que no se adecuaban correctamente al comportamiento de gases ligeros y flotantes como el hidrógeno.

Por el contrario, el software PHAST™ demostró una mayor robustez y versatilidad en la simulación de estos fenómenos. Según Saturnino (2024), PHAST™ permitió reproducir con precisión la ubicación de sensores y la evolución temporal de la concentración del gas, facilitando la identificación del régimen estacionario. Para la caracterización de *jet fires*, el uso del modelo de Miller integrado en PHAST™ (específico para gases de baja luminosidad) permitió contabilizar adecuadamente los efectos del viento y la flotabilidad, resultando en una herramienta recomendada sobre ALOHA™ para este tipo de análisis de riesgos, a pesar de presentar una tendencia a la sobreestimación conservadora en la longitud de la llama.

Esta disparidad en la precisión de los modelos no es exclusiva del hidrógeno. En una evaluación paralela sobre el análisis de consecuencias para sustancias químicas peligrosas, Bhattacharya y Kumar (2015) compararon el desempeño de ambos softwares simulando una fuga de 2 pulgadas en un tanque de almacenamiento de n-Butanol durante una hora. Al contrastar los resultados, los autores concluyeron que PHAST™ generó escenarios más realistas y consistentes con los datos de entrada reales, superando la capacidad de predicción de ALOHA™ para este tipo de liberaciones prolongadas en tanques de almacenamiento. Esto sugiere que la robustez de PHAST™ es un factor determinante no solo en gases ligeros, sino también en la modelación de escenarios con líquidos inflamables convencionales.

Finalmente, la versatilidad de estas herramientas ha sido contrastada en el sector de las energías renovables, específicamente en instalaciones de biogás. Özay et al. (2021) realizaron un análisis de consecuencias para explosiones de metano en Estambul, comparando la respuesta de ambos softwares ante fugas en tanques de almacenamiento y rupturas catastróficas.

En su investigación, se evidenció una limitación operativa crítica de ALOHA™: Su incapacidad para modelar mezclas químicas complejas, lo que obligó a simplificar el biogás asumiendo que era metano puro para poder ejecutar la simulación. En cuanto a los resultados, se observó una discrepancia en la estimación de riesgos; mientras que ALOHA™ tendió a predecir zonas de afectación por sobrepresión (rotura de cristales) más extensas en escenarios de fuga simple, PHAST™ demostró su superioridad al permitir la modelación de escenarios de "ruptura catastrófica" con mayor rigor físico. Los autores concluyeron que, si bien ALOHA™ es útil para una estimación preliminar conservadora, PHAST™ es indispensable para determinar con precisión las zonas de máximo riesgo (como la radiación térmica por bolas de fuego) y para considerar variables meteorológicas cambiantes que ALOHA™ asume como constantes.

#### 4.12 Simuladores de procesos químicos aplicados a la prevención de riesgos

En este grupo se encuentran ASPEN PLUS™, ASPEN HYSYS™ y DWSIM™, softwares cuyo objetivo principal es el diseño, análisis y optimización de procesos industriales, pero que desempeñan un papel relevante en la prevención de riesgos químicos. ASPEN PLUS™ destaca por su rigor termodinámico y su aplicación en la simulación de procesos en estado estacionario,



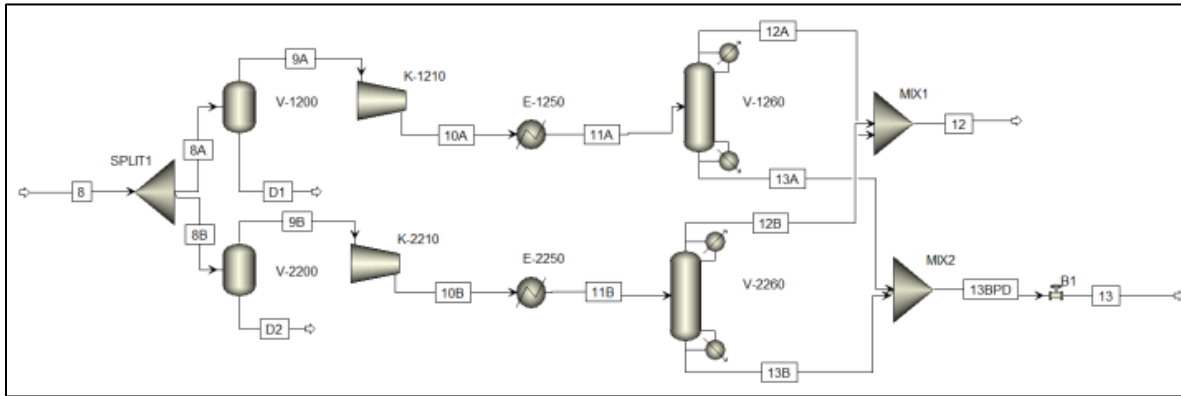


Figura 4.2. Modelo de compresión de refuerzo en ASPEN PLUS™. Fuente: Tangsriwong et al, 2020.

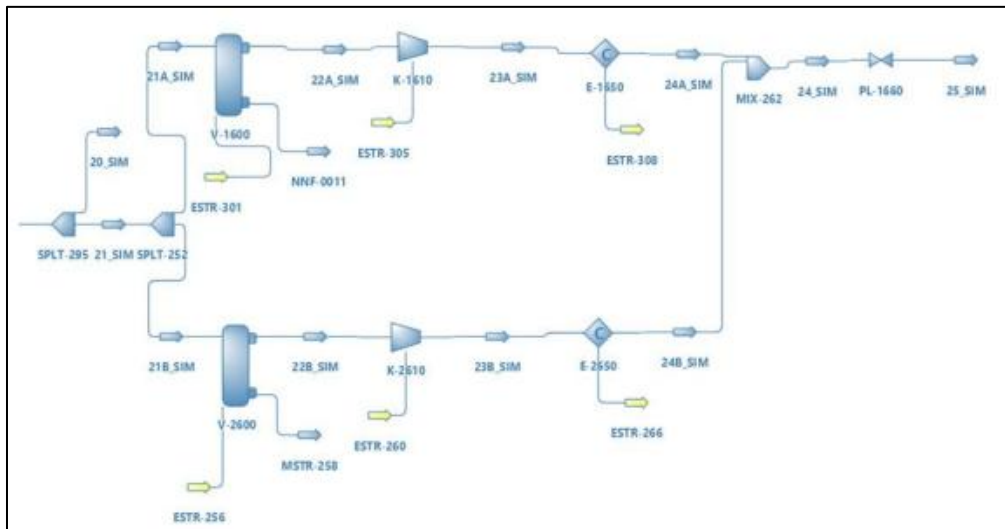


Figura 4.3. Equipos de proceso de compresión y exportación de gas de venta en DWSIM™. Fuente: Tangsriwong et al, 2020.

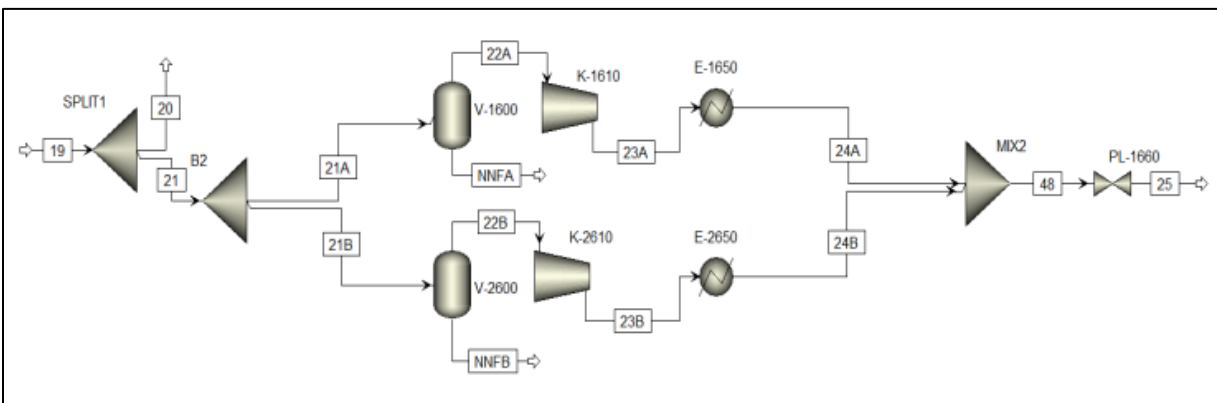
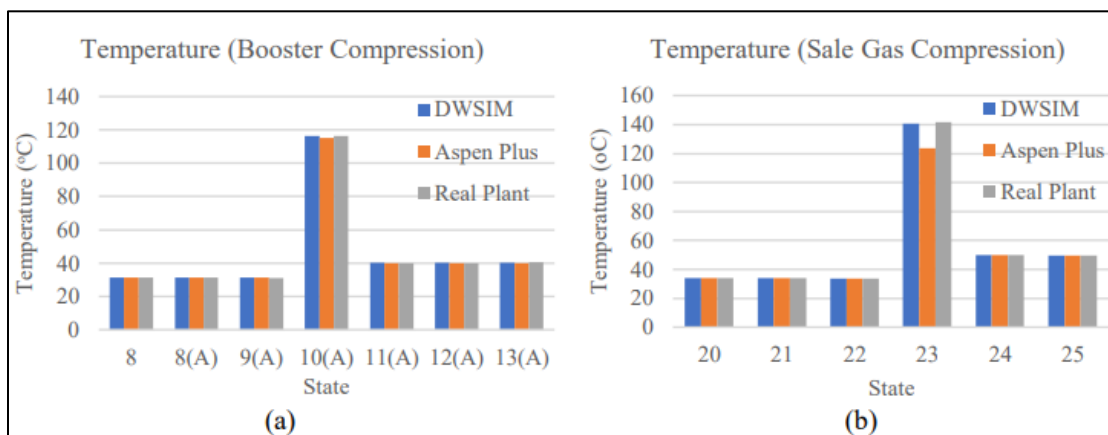


Figura 4.4. Equipos de proceso de compresión y exportación de gas de venta en ASPEN PLUS™. Fuente: Tangsriwong et al, 2020.

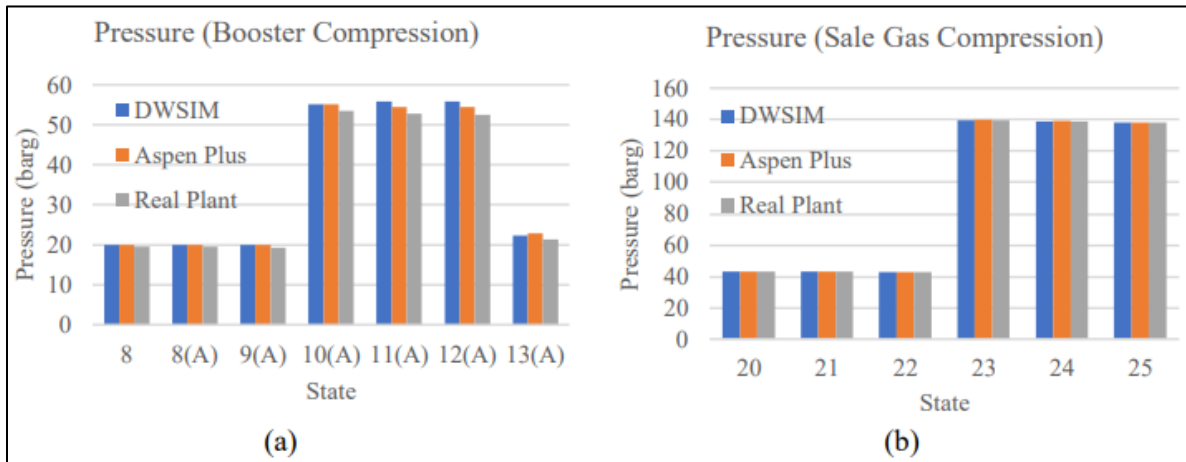
Al validar los resultados frente a los datos reales de balance de masa y energía de la planta, el estudio demostró una alta consistencia entre ambas herramientas. Se observó que las discrepancias entre las predicciones de DWSIM™ y ASPEN PLUS™ fueron, en general, inferiores al 5% para variables críticas como temperatura, presión y composición química, salvo en puntos específicos relacionados con cambios de fase. Con base en estos hallazgos, los autores concluyeron que DWSIM™ ofrece una precisión aceptable y puede fungir como una alternativa efectiva y de bajo costo frente a licencias comerciales para el modelado de procesos de hidrocarburos (ver Figura 4.5 a la Figura 4.7).

La Figura 4.5 “compara los resultados de la simulación de DWSIM™ y ASPEN PLUS™ con los valores reportados por la Planta Real. En general, existe una excelente concordancia entre los valores calculados y los reportados. En los módulos de Compresión de Refuerzo y Compresión de Gas de Venta, la diferencia es inferior al 1% en casi todos los estados, excepto en el estado 23, calculado por ASPEN PLUS™. En este caso, el error de temperatura es del 12.733%, lo cual puede deberse a diferentes métodos de cálculo y suposiciones entre estos dos códigos” (Tangsrirong et al, 2020).



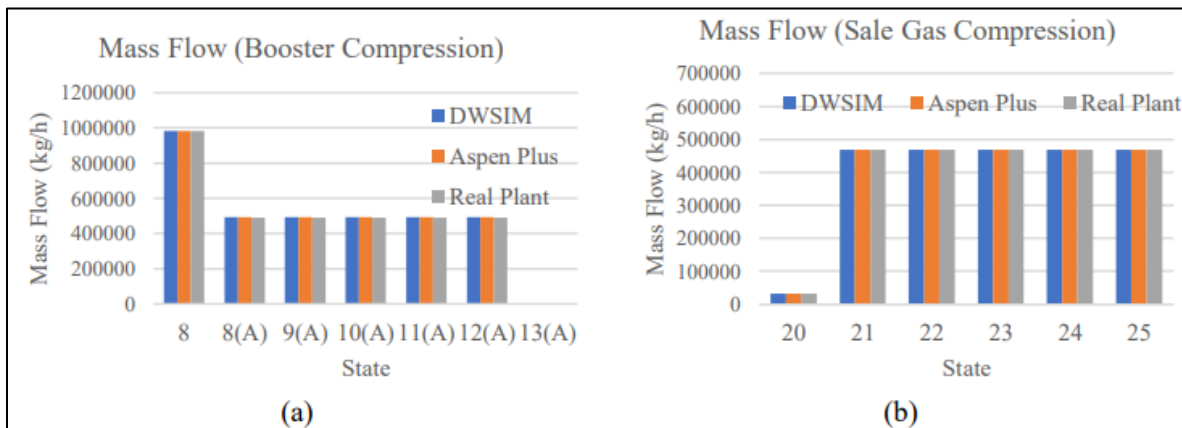
**Figura 4.5. Comparación de la temperatura de cada estado para (a) compresión del amplificador (b) compresión del gas de venta. Fuente: Tangsrirong et al, 2020.**

La Figura 4.6 muestra que “en el caso de la presión de cada estado, compara los resultados de simulación de DWSIM™ y ASPEN PLUS™ con los valores reportados por HMB. Nuevamente, concuerdan bastante bien, excepto en ciertos estados. En este caso, se observó que la desviación máxima ocurre en el estado 13A, según lo calculado por ASPEN PLUS™, en un 7,771 %. El estado 13A es el estado desde el cual los productos gaseosos salen del separador de compuestos. Este estado presentó una desviación ligeramente mayor que otros, ya que DWSIM™ predijo este estado como líquido, mientras que ASPEN PLUS™ lo predijo como vapor. Por lo tanto, la densidad y el caudal volumétrico predichos por DWSIM™ y ASPEN PLUS™ fueron significativamente diferentes. En cualquier caso, la diferencia en la densidad no afectó significativamente el cálculo de la presión, ya que la diferencia entre DWSIM™ y ASPEN™ fue inferior al 1 %” (Tangsrirong et al, 2020).



**Figura 4.6. Comparación de la presión de cada estado para (a) compresión del amplificador (b) compresión del gas de venta. Fuente: Tangsriwong et al, 2020.**

La Figura 4.7 muestra “para el caudal másico, la desviación entre los valores calculados y los reportados es muy pequeña para la mayoría de los estados, excepto para el estado 13A, que se predijo como líquido con DWSIM™ y vapor con ASPEN PLUS™. En este estado, la diferencia entre los resultados de la simulación y los valores reportados fue del 6,37 % para DWSIM™ y del 18,50 % para ASPEN PLUS™, respectivamente. Estos errores pueden deberse a la acumulación de pequeñas desviaciones en el estado anterior. Sin embargo, el caudal del estado 13A es insignificante en comparación con el de otros estados, por lo que la desviación puede ser insignificante” (Tangsriwong et al, 2020).



**Figura 4.7. Comparación del caudal másico de cada estado para (a) compresión de refuerzo (b) compresión de gas de venta. Fuente: Tangsriwong et al, 2020.**

Además de las comparativas con ASPEN PLUS™, es crucial contrastar el desempeño de DWSIM™ frente a ASPEN HYSYS™, ampliamente considerado el estándar industrial para la simulación de procesos en estado estacionario. En este contexto, Ullah et al. (2022) realizaron un análisis comparativo exhaustivo modelando tres operaciones unitarias fundamentales: un sistema de separación flash, una columna de destilación y un intercambiador de calor de tubo y coraza.

El estudio utilizó idénticos datos de entrada y paquetes termodinámicos para ambos simuladores. Los resultados obtenidos demostraron una alta consistencia técnica; las discrepancias en variables críticas como temperatura, presión, flujos molares y deberes térmicos se mantuvieron por debajo del 5%. Específicamente, en el diseño de la columna de destilación, parámetros de diseño clave como el número mínimo de platos y la etapa óptima de alimentación mostraron una alineación casi exacta entre la solución comercial y la de código abierto. Estos hallazgos validan la capacidad de DWSIM™ para ofrecer resultados precisos y confiables en operaciones unitarias estándar, destacándose no solo por su precisión técnica, sino también por su accesibilidad y facilidad de reporte frente a las restricciones de licencia de software propietario como HYSYS™.

### Caso 1 (Mezclador y Separador Flash)

Se mezclaron primero dos corrientes (de benceno y tolueno) y luego se separaron en líquido y vapor (de benceno y tolueno) (ver Figura 4.8 y 4.9).

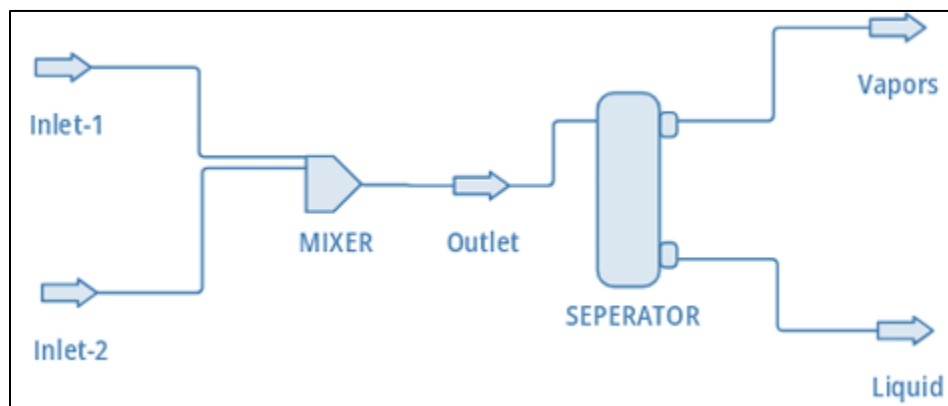


Figura 4.8. Diagrama de flujo del caso 1 en DWSIM™. Fuente: Ullah et al, 2022.

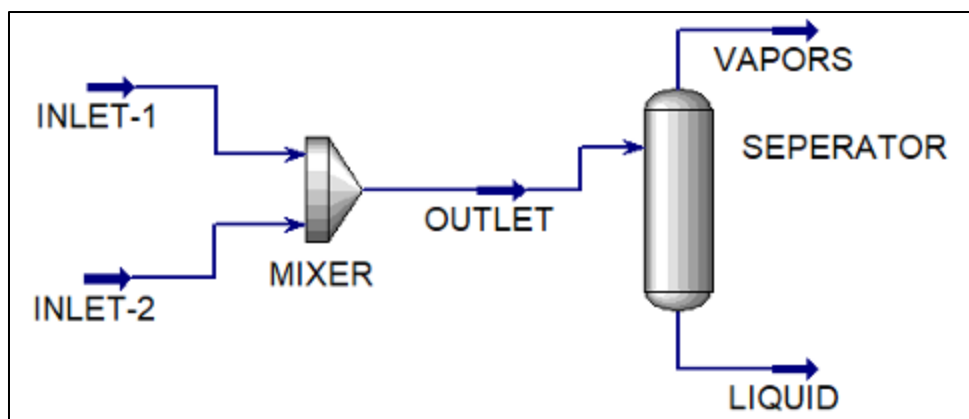


Figura 4.9. Diagrama de flujo del caso 1 en ASPEN HYSYS™. Fuente: Ullah et al, 2022.

## Caso 2 (Columna de destilación de acceso directo)

Una columna de destilación de acceso directo es una herramienta de software de simulación que genera rápidamente un modelo de destilación para la separación de la corriente de alimentación con poca información (ver Figura 4.10 y 4.11).

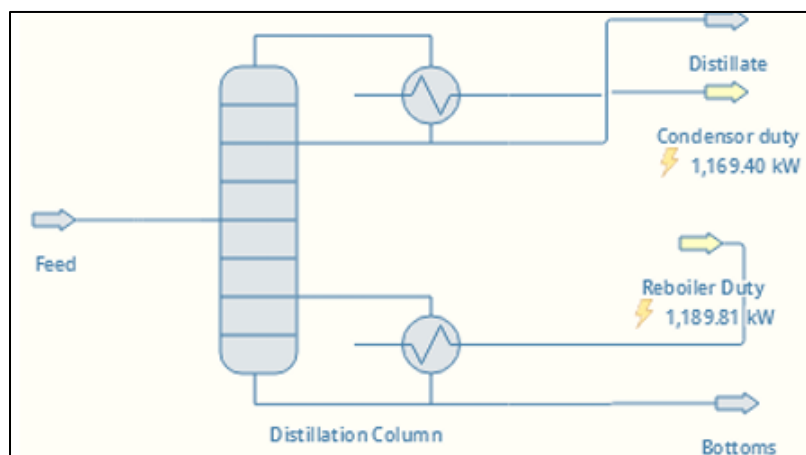


Figura 4.10. Diagrama de flujo del caso 2 en DWSIM™. Fuente: Ullah et al, 2022.

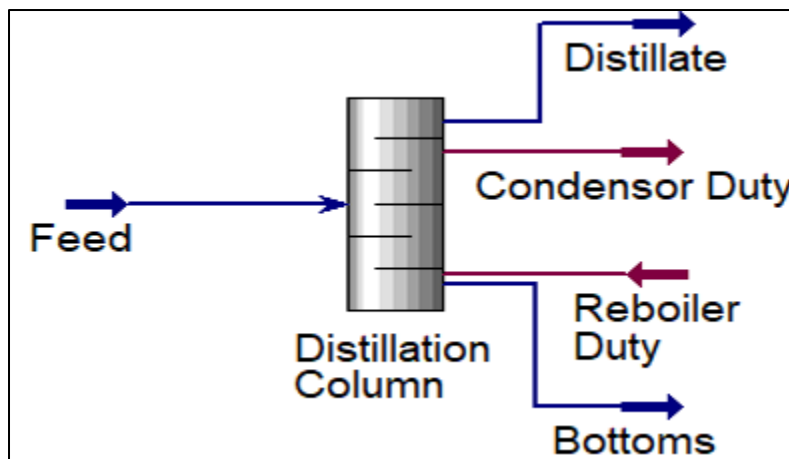
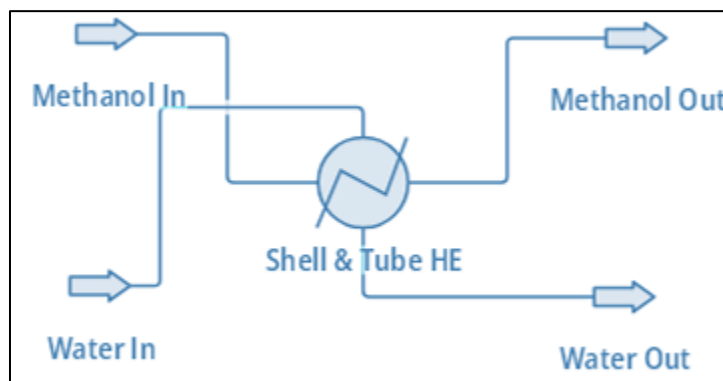


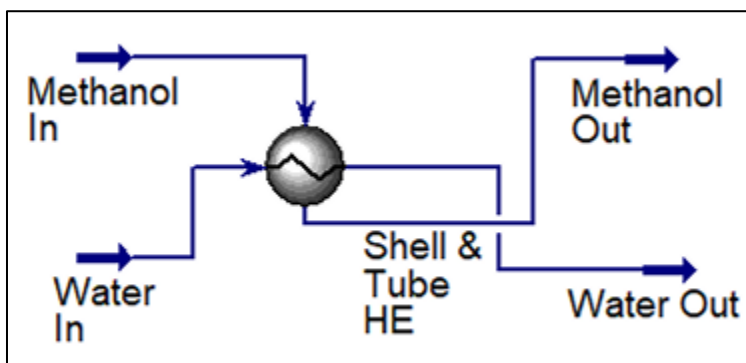
Figura 4.11. Diagrama de flujo del caso 2 en ASPEN HYSYS™. Fuente: Ullah et al, 2022.

### Caso 3 (Intercambiador de calor tubular)

El intercambio de calor se produce normalmente en todas las industrias de proceso donde se utilizan diferentes tipos de intercambiadores de calor (ver Figura 4.12 y 4.13).



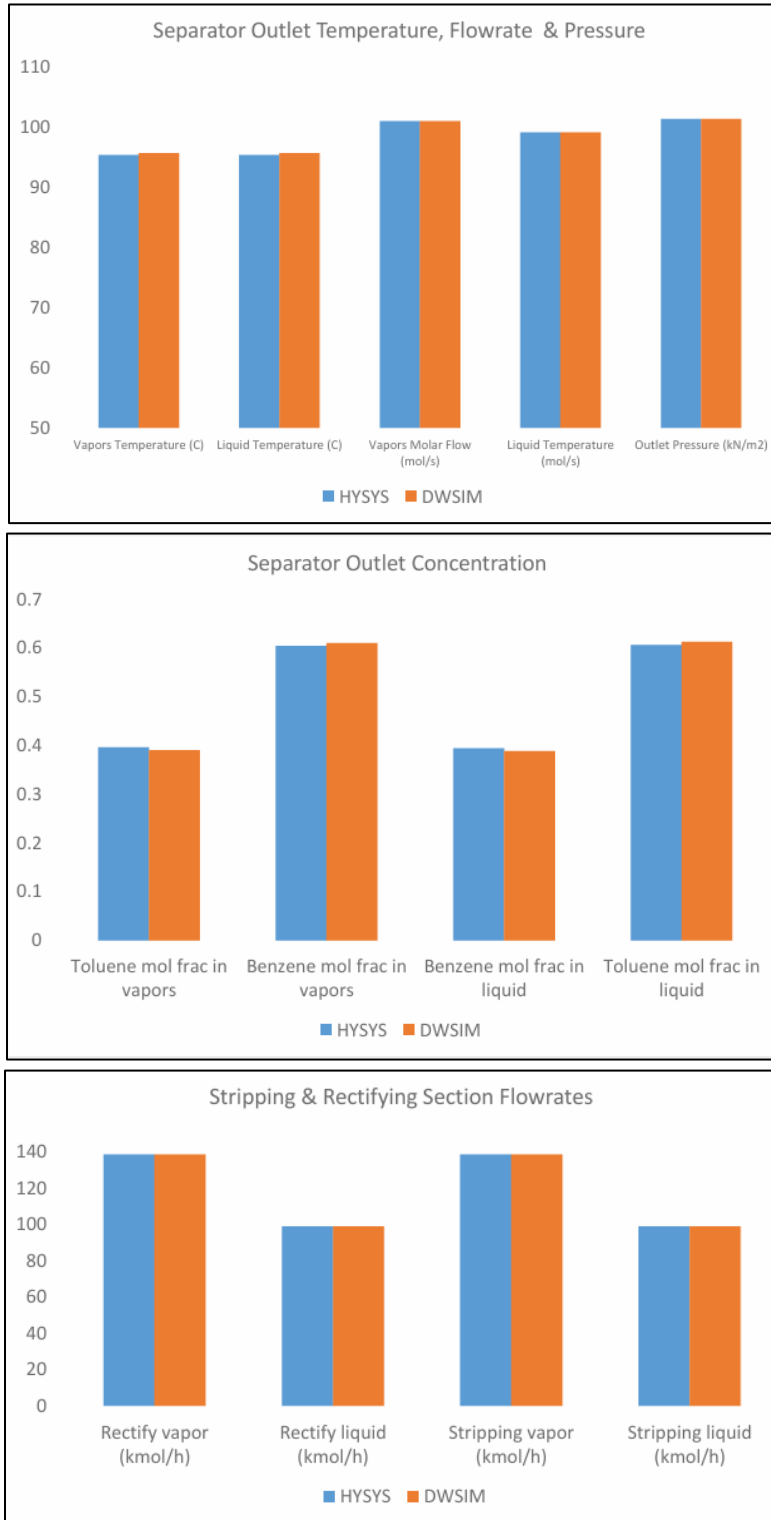
**Figura 4.12. Diagrama de flujo del caso 3 en DWSIM™. Fuente: Ullah et al, 2022.**



**Figura 4.13. Diagrama de flujo del caso 3 en ASPEN HYSYS™. Fuente: Ullah et al, 2022.**

Como se puede apreciar en la Figura 4.14 comparativa de parámetros de salida del separador, la variabilidad entre los resultados obtenidos mediante ASPEN HYSYS™ y DWSIM™ es prácticamente insignificante. El análisis visual de las variables críticas que incluyen temperatura de vapores y líquidos, flujos molares y presión de salida, demuestra una alta consistencia técnica entre ambos simuladores.

Las barras correspondientes a ambos softwares presentan magnitudes casi idénticas para cada una de las cinco categorías evaluadas, lo que indica que no existen discrepancias significativas en los balances de materia y energía calculados. Esta alineación casi perfecta en las alturas de las barras confirma que, para operaciones unitarias de separación flash bajo las condiciones estudiadas, DWSIM™ es capaz de replicar con extrema fidelidad los resultados del software comercial, validando su precisión termodinámica sin presentar desviaciones operativas relevantes.



**Figura 4.14. Gráficas comparativas de resultados. Fuente: Ullah et al, 2022.**

#### 4.13 Softwares de simulación multifísica

COMSOL MULTIPHYSICS™ se clasifica dentro de los programas de simulación multifísica, caracterizados por la integración de diversos fenómenos físicos y químicos en un mismo modelo. Su fortaleza principal radica en la posibilidad de acoplar reacciones químicas, transferencia de calor y dinámica de fluidos, lo que permite analizar procesos complejos con un alto nivel de detalle. Esta capacidad resulta especialmente útil para la evaluación de riesgos asociados a gradientes térmicos, hotspots, dispersión de contaminantes y procesos electroquímicos. Sin embargo, la correcta aplicación de COMSOL™ requiere un alto grado de especialización técnica y un mayor tiempo de modelación en comparación con otras herramientas más orientadas a la práctica industrial.

#### 4.14 Softwares para análisis probabilístico y evaluación de incertidumbre

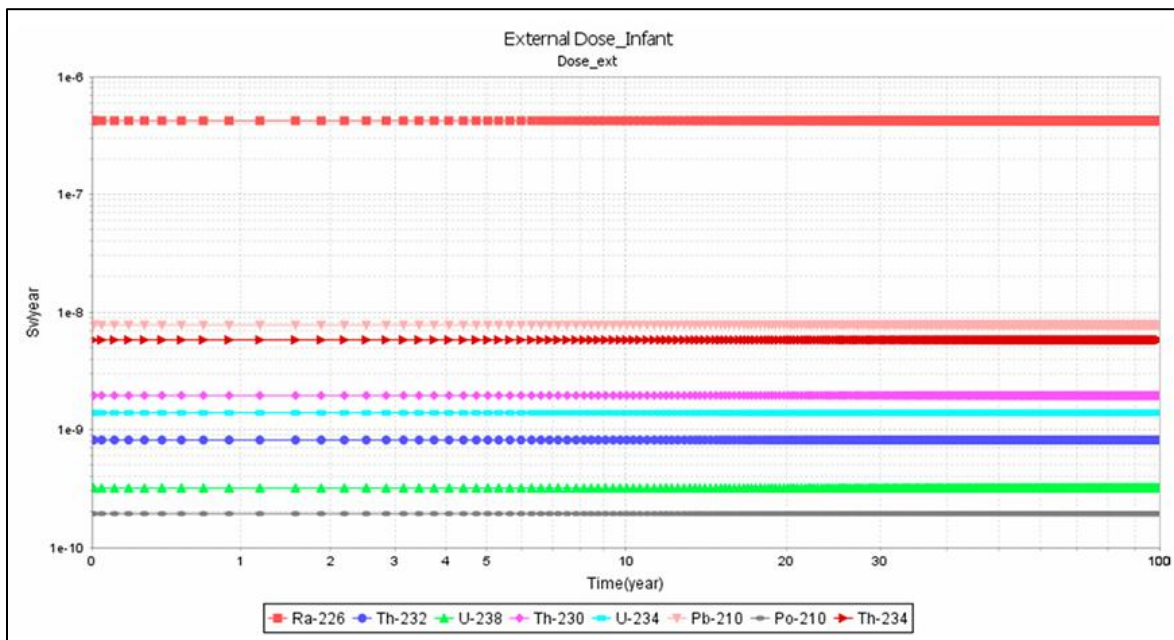
En el ámbito del análisis probabilístico, ECOLEGO™ destaca por su enfoque en la modelación de sistemas dinámicos con incertidumbre. Su capacidad para realizar simulaciones deterministas y probabilísticas mediante técnicas como Monte Carlo y análisis de sensibilidad permite evaluar la variabilidad de los resultados ante cambios en los parámetros de entrada. Este enfoque resulta particularmente relevante en estudios ambientales y de riesgo a largo plazo, donde la incertidumbre juega un papel determinante. Aunque su aplicación directa en la industria química es más limitada, ECOLEGO™ complementa de manera efectiva los análisis deterministas realizados con otros softwares.

Un ejemplo claro de aplicación destacado de ECOLEGO™ se encuentra en la evaluación de riesgos ambientales y de salud en comunidades mineras. En un estudio realizado en Sudáfrica, el software se empleó para predecir el comportamiento a largo plazo de las concentraciones de radionucleidos (tales como isótopos de uranio, torio y radio) en el aire y el suelo en los alrededores de tres instalaciones de extracción de oro y uranio (Dudu et al., 2025). Mediante su sistema de modelado dinámico de compartimentos, ECOLEGO™ permitió simular el transporte de estos contaminantes y las vías de exposición humana durante un horizonte temporal de 100 años, lo cual representa el ciclo de una vida humana aproximada (Dudu et al., 2025).

La flexibilidad de la herramienta facilitó el análisis de rutas de exposición específicas, centrándose particularmente en la inhalación de partículas de polvo resuspendidas y en la exposición a la radiación externa (Dudu et al., 2025). El modelo logró diferenciar y cuantificar el impacto radiológico en distintos grupos poblacionales, evaluando de forma independiente a adultos y a infantes de uno a dos años (Dudu et al., 2025). Las simulaciones evidenciaron que, debido a factores fisiológicos como mayores tasas de respiración, las dosis por inhalación en adultos fueron notablemente superiores a las de los infantes, y permitieron identificar los radionucleidos específicos (como el Th-234 y el Ra-226) que representaban el mayor riesgo radiológico en cada vía de exposición (Dudu et al., 2025).

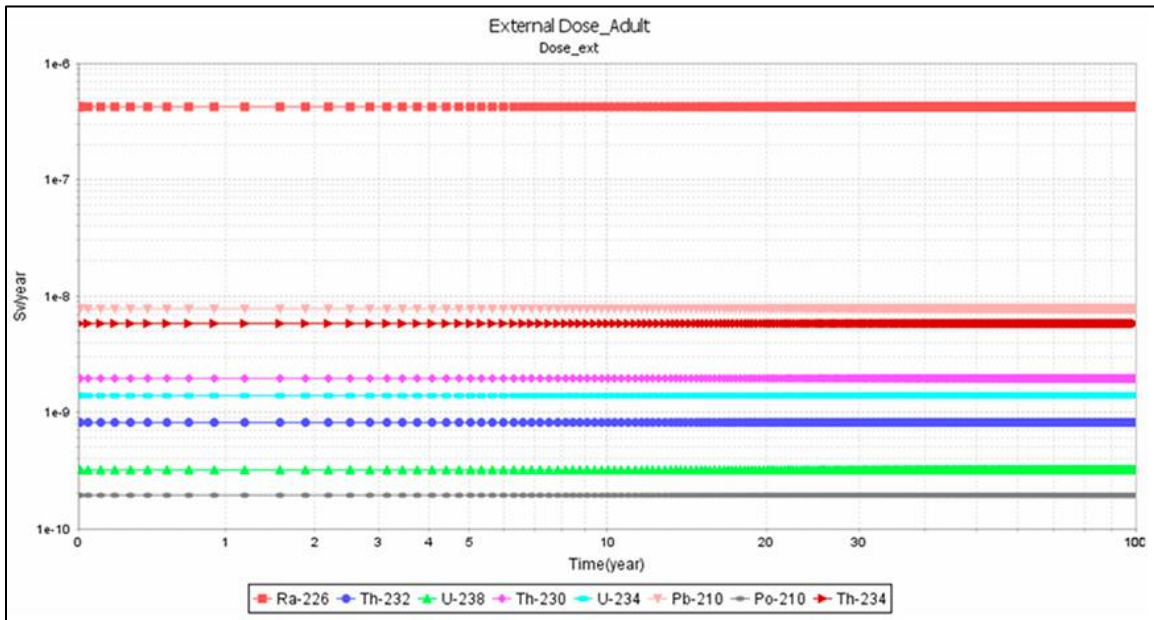
Para complementar la evaluación de riesgos radiológicos utilizando ECOLEGO™ en el contexto minero de Sudáfrica (Dudu et al., 2025), se presentan a continuación proyecciones temporales clave de dosis y concentraciones.

En la Figura 4.15 se exhibe la dosis externa proyectada a 100 años para un receptor infante ubicado en el Área C. Se observa que los valores de dosis permanecen en un orden de magnitud extremadamente bajo, a lo largo del tiempo simulado.



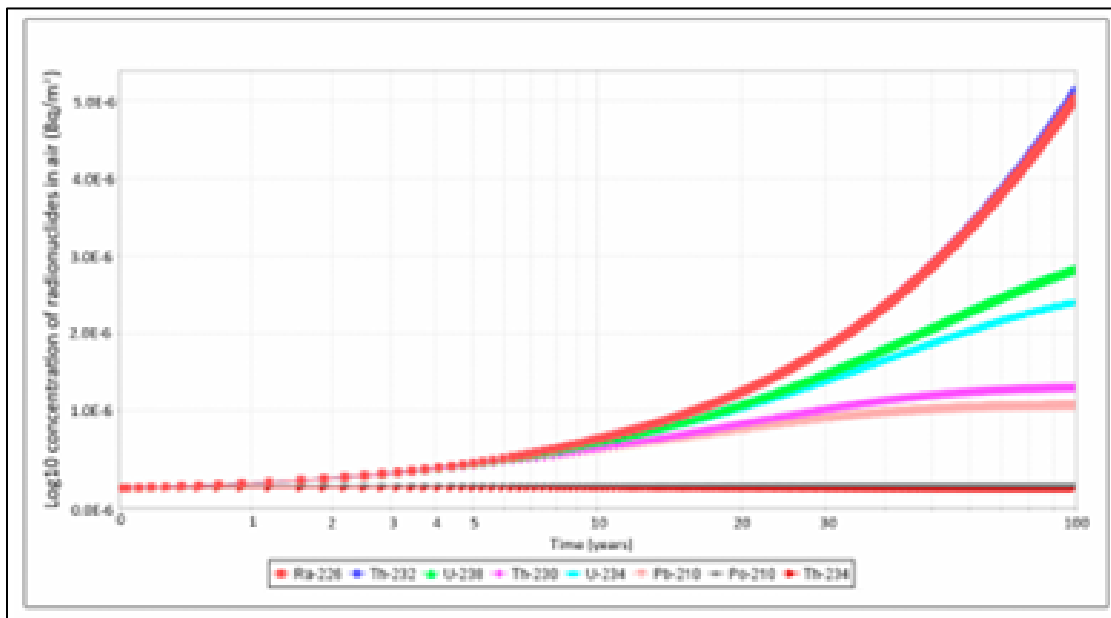
**Figura 4.15. Proyección temporal de exposición de dosis a un infante. Fuente: Dudu et al, 2025.**

Por el contrario, la Figura 4.16 presenta la proyección de dosis externa para un receptor adulto en la misma Área C. Al contrastar ambas figuras, resulta evidente que la dosis externa acumulada para el adulto es significativamente superior a la del infante. Esta diferencia subraya la importancia de considerar la fisiología y los hábitos de los distintos grupos poblacionales en la evaluación de riesgos radiológicos.



**Figura 4.16. Proyección temporal de exposición de dosis a un adulto. Fuente: Dudu et al, 2025.**

Finalmente, la Figura 4.17 muestra la concentración logarítmica (Log10) en el aire de diversos radionúclidos clave (Th-232, U-235, U-238, Ra-226, Pb-210, Po-210) a lo largo de 100 años en la Mina B. Esta gráfica permite visualizar la estabilidad de las concentraciones atmosféricas de estos contaminantes una vez alcanzado el equilibrio en el modelo compartimental para este escenario específico.



**Figura 4.17. Concentración Log10 de radionúclidos en el compartimento de aire de la Mina B a lo largo de 100 años. Fuente: Dudu et al, 2025.**

Este tipo de estudios demuestra que la aplicación de ECOLEGO™ va más allá del cálculo teórico, siendo fundamental para identificar vías de exposición críticas y cuantificar riesgos en poblaciones vulnerables expuestas a actividades industriales (Dudu et al., 2025). La capacidad del software para manejar simulaciones ambientales complejas proporciona datos cruciales para informar estrategias de promoción de la salud, guiar los esfuerzos de remediación ambiental y apoyar el diseño de políticas regulatorias más estrictas. De este modo, la plataforma se consolida como un recurso esencial para gestionar la incertidumbre en escenarios de contaminación crónica, garantizando la protección de la salud pública a largo plazo.

En la Figura 4.18 se detallan los radionúclidos seleccionados para el estudio junto con sus respectivos periodos de semidesintegración (vida media), los cuales funcionan como datos de entrada fundamentales para la simulación.

<b>Appendix A. Input Data for ECOLEGO Simulation</b>	
<b>Table A1. Radionuclides and their half-lives.</b>	
<b>Radionuclide</b>	<b>Half-Life</b>
$^{238}\text{U}$	$4.5 \times 10^9$ years
$^{234}\text{Th}$	24 days
$^{234}\text{U}$	$2.5 \times 10^5$ years
$^{230}\text{Th}$	$7.5 \times 10^4$ years
$^{226}\text{Ra}$	1600 years
$^{210}\text{Pb}$	22.2 years
$^{210}\text{Po}$	138 days
$^{232}\text{Th}$	$1.405 \times 10^{10}$ years

**Figura 4.18. Radionúclidos y su vida media utilizados como parámetros del modelo. Fuente: Dudu et al, 2025.**

Un contexto adicional de gran relevancia para la aplicación de ECOLEGO™ es la vigilancia ambiental y la restauración tras emergencias nucleares. Un claro ejemplo es el estudio predictivo realizado tras el accidente de la central nuclear de Fukushima Daiichi en Japón en 2011. En este caso, el software fue utilizado para evaluar la deposición de radionucleidos, como el I-131 y los isótopos de cesio (Cs-134, Cs-137) y estroncio (Sr-89, Sr-90), en los suelos de localidades fuertemente afectadas como Namie e Iitate (Krisanangkura et al., 2013). El modelo matemático implementado permitió proyectar el transporte de estos contaminantes a través de la cadena alimentaria terrestre, abarcando su paso desde el suelo hacia diversos cultivos, forrajes y, finalmente, a la exposición humana mediante el consumo de productos derivados del ganado, como la carne y la leche (Krisanangkura et al., 2013).

En la Figura 4.19 se muestran las vidas medias de los radionúclidos y constante de desintegración, esenciales como datos de entrada para partir con la simulación.

Nuclide	Half-life ( $T_{1/2}$ )	$\lambda_i$ ( $d^{-1}$ )
Cs-134	2.06 y	$9.22 \times 10^{-4}$
Cs-137	30.0 y	$6.33 \times 10^{-5}$
I-131	8.04 d	$8.62 \times 10^{-2}$
Sr-89	50.5 d	$1.37 \times 10^{-2}$
Sr-90	29.1 y	$6.53 \times 10^{-5}$

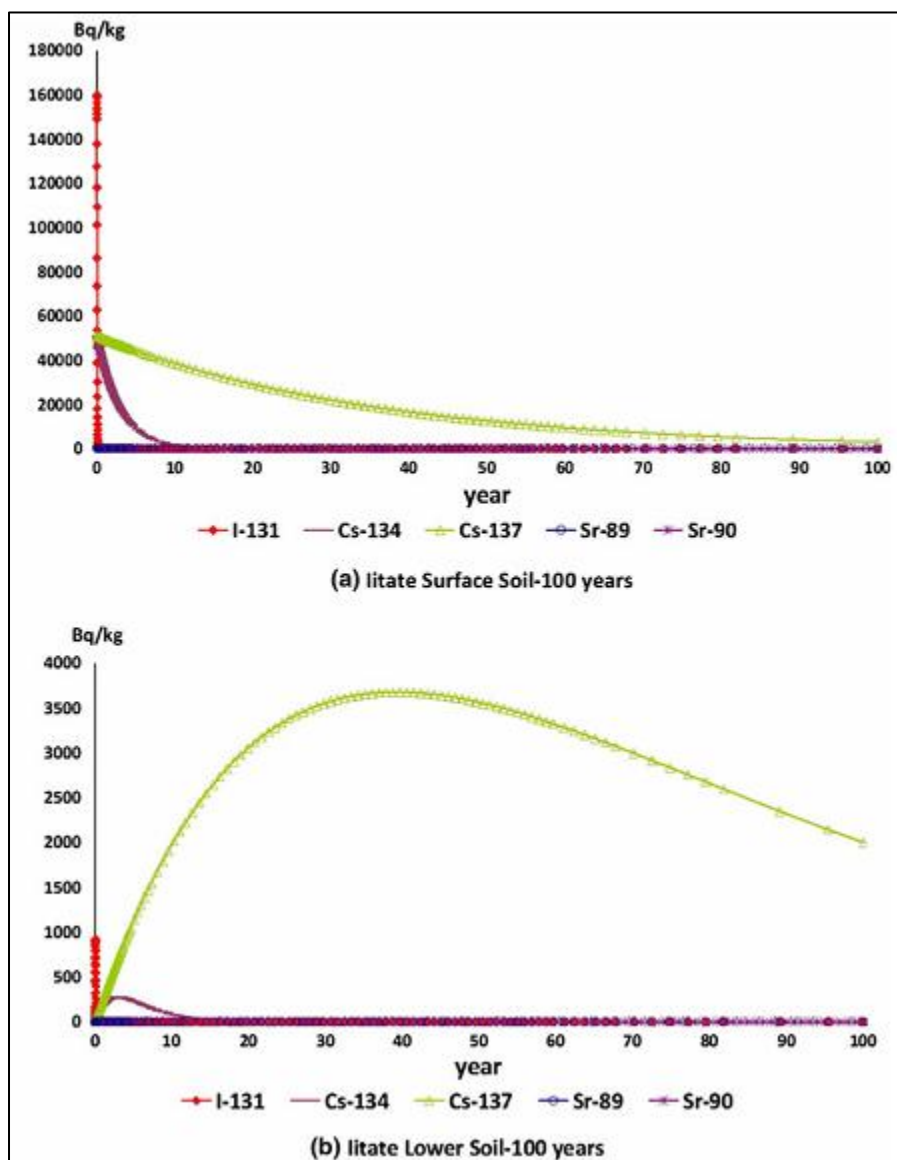
**Figura 4.19. Radionúclidos y su vida media utilizados como parámetros del modelo. Fuente: Krisanangkura et al., 2013.**

Mediante su capacidad de simulación dinámica a lo largo de un siglo, ECOLEGO™ facilitó el análisis del comportamiento diferenciado de los radionucleidos según su vida media y las características del medio geológico. Las proyecciones demostraron cómo isótopos de vida corta decaían rápidamente, mientras que elementos de mayor persistencia como el Cs-137 presentaban una movilidad gradual desde la capa superficial hacia los estratos inferiores del suelo, superando la velocidad de su decaimiento radiactivo inicial (Krisanangkura et al., 2013). Asimismo, la herramienta integró factores de transferencia específicos para distintos tipos de plantas, revelando que los cultivos de raíces superficiales (como tubérculos y hortalizas de hoja) eran significativamente más susceptibles a la captación de contaminantes en comparación con los árboles leñosos de raíces profundas, lo que permitió predecir la prolongada retención de radiactividad en productos cárnicos a lo largo de décadas (Krisanangkura et al., 2013).

Para ilustrar el comportamiento dinámico de los contaminantes depositados en el entorno, la Figura 4.20 presenta las proyecciones del perfil de actividades radiactivas en la localidad de litate a lo largo de un siglo, modeladas mediante ECOLEGO™. Esta evaluación se divide en dos compartimentos ambientales: (a) el suelo superficial y (b) el suelo profundo.

En la gráfica superior (a), se observa que la concentración de todos los radionucleidos en la superficie disminuye invariablemente con el tiempo. Isótopos de vida corta, como el I-131, experimentan una caída abrupta hasta niveles indetectables en los primeros años, mientras que elementos más persistentes, como el Cs-137, exhiben un decaimiento mucho más gradual.

Por el contrario, la gráfica inferior (b) revela una dinámica más compleja producto de la interacción entre el decaimiento radiactivo y los fenómenos de transporte. En el suelo profundo, la actividad del Cs-137 no disminuye desde el inicio; por el contrario, se incrementa de manera progresiva hasta alcanzar un pico máximo entre los 30 y 40 años posteriores al evento, para después comenzar a descender. Este comportamiento indica que, durante las primeras décadas, la tasa a la cual el cesio migra o se lixivía desde la capa superficial hacia el estrato inferior es mayor que su tasa de decaimiento radiactivo natural.

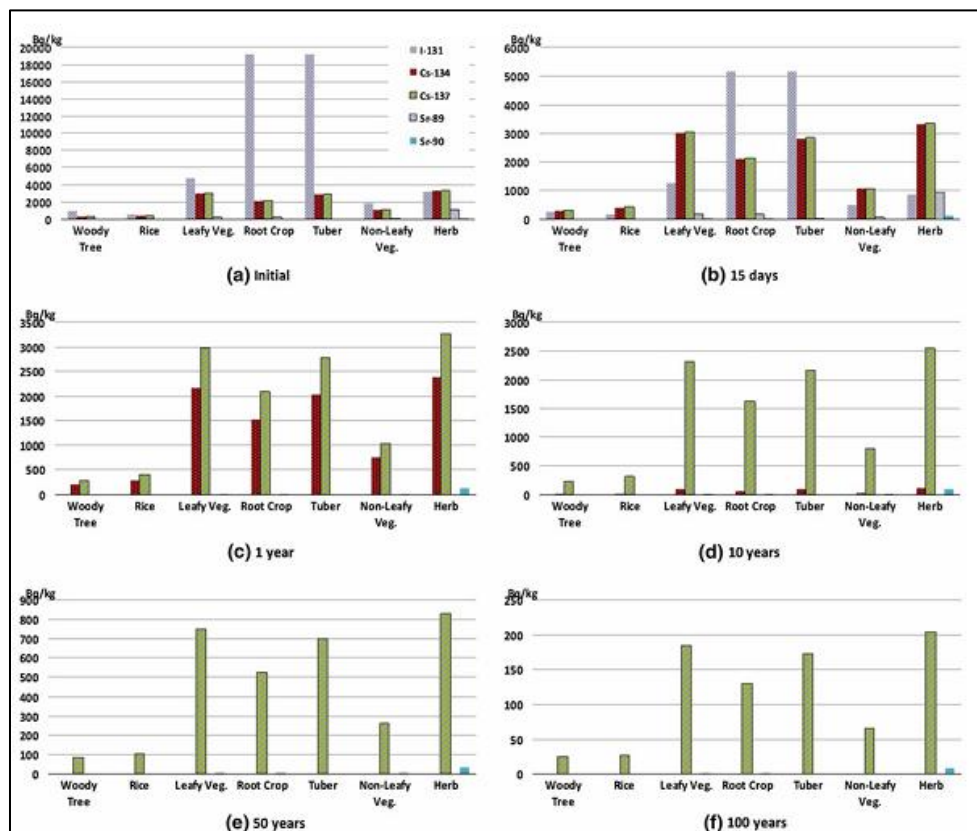


**Figura 4.20. Predicción de las actividades de radionucleidos en el perfil del suelo en función del tiempo para la localidad de litate: (a) suelo superficial y (b) suelo profundo. Fuente: Krisanangkura et al., 2013.**

La Figura 4.21 ilustra la predicción de las actividades de los radionucleidos asimilados por una serie de cultivos locales en seis cortes temporales: (a) inicial, (b) 15 días, (c) 1 año, (d) 10 años, (e) 50 años y (f) 100 años. El análisis de estas gráficas revela que la captación de contaminantes depende fuertemente de la anatomía de la especie vegetal y de la vida media del isótopo.

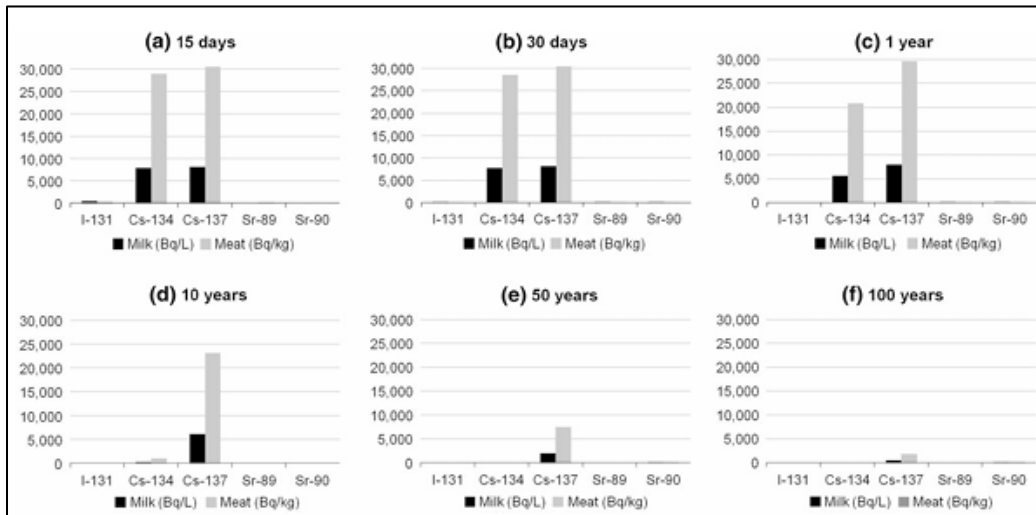
En las proyecciones a corto plazo (a y b), el I-131 presenta concentraciones muy elevadas, particularmente en los cultivos de raíz y tubérculos; sin embargo, debido a su corta vida media, este isótopo desaparece por completo de la cadena trófica para el primer año (c). Por el contrario, las hortalizas de hoja y las hierbas muestran una alta susceptibilidad a la asimilación de isótopos

de cesio (Cs-134 y Cs-137). A largo plazo (e y f), el modelo confirma que el Cs-137 se consolida como el contaminante más persistente, manteniéndose como la fuente principal de radiactividad incluso un siglo después del evento. Asimismo, es notable cómo los árboles leñosos y el arroz exhiben niveles de contaminación considerablemente menores a lo largo de todo el periodo analizado.



**Figura 4.21. Evolución temporal de la concentración de radionucleidos en diversos cultivos locales a lo largo de 100 años: (a) inicial, (b) 15 días, (c) 1 año, (d) 10 años, (e) 50 años y (f) 100 años. Fuente: Krisanangkura et al., 2013.**

La Figura 4.22 presenta la predicción de las actividades de radionucleidos asimilados en productos derivados del ganado, específicamente leche (Bq/L) y carne (Bq/kg), evaluados en seis cortes temporales que abarcan desde los 15 días, 30 días, 1 año, 10 años, 50 años y 100 años posteriores al evento. Los resultados del modelo revelan que la contaminación radiactiva afecta de manera mucho más severa a los productos cárnicos que a la leche.



**Figura 4.22. Evolución de la contaminación por radionucleidos en leche y carne animal a lo largo de un siglo. Fuente: Krisanangkura et al., 2013.**

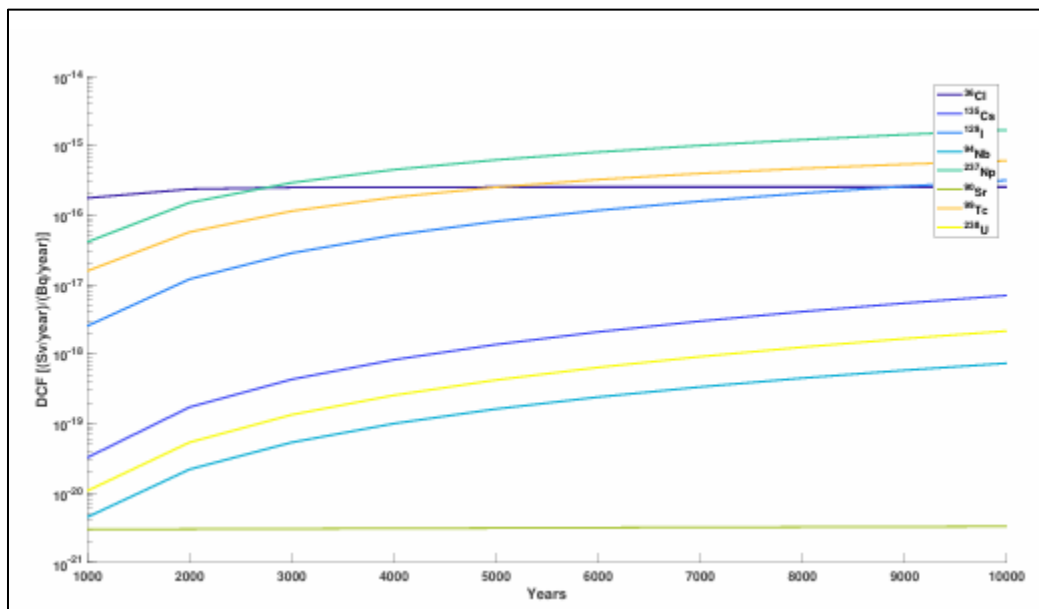
Las actividades de un número de núclidos radiactivos se presentan aquí en la Figura 4.22 para ciertos periodos. Los datos indicaron que la contaminación por los radionúclidos, especialmente el cesio, afectaría mucho más a los productos cárnicos que a la leche. Incluso después de décadas, el contenido de cesio todavía puede observarse.

La implementación de ECOLEGO™ en este escenario post-accidente subraya su enorme utilidad para la gestión de crisis y la comunicación de riesgos. Al estructurar la evaluación de sistemas ecológicos complejos bajo condiciones de alta incertidumbre, el software proporcionó estimaciones clave para orientar los programas de muestreo y garantizar la seguridad alimentaria en las zonas aledañas (Krisanangkura et al., 2013). Más aún, este tipo de modelado predictivo resulta esencial para establecer marcos de tiempo realistas sobre la viabilidad de rehabilitar zonas de exclusión, demostrando que la evaluación probabilística no solo cuantifica el impacto ambiental, sino que actúa como un pilar fundamental para la protección del público y la eventual restauración del ecosistema.

Otra aplicación fundamental de esta capacidad predictiva y de evaluación de incertidumbre a largo plazo se observa en el estudio desarrollado por Pohjola et al. en 2019. En dicha investigación, ECOLEGO™ fue utilizado para evaluar el impacto de los sedimentos del fondo de un lago en las dosis de radiación a humanos, derivadas de una liberación de radionucleidos mediada por aguas subterráneas en un entorno agrícola (Pohjola et al., 2019).

Para este modelado dinámico, la plataforma permitió calcular los factores de conversión de dosis y realizar un análisis de sensibilidad detallado. El software procesó automáticamente las vidas medias de los radionucleidos gracias a su base de datos integrada e implementó métodos de evaluación de varianza (como el método de Morris, EFAST y Sobol) (Pohjola et al., 2019). Esto fue crucial para manejar las amplias distribuciones de datos probabilísticos que surgen al proyectar escenarios de hasta 10,000 años en el futuro.

La Figura 4.23 detalla la evolución temporal, calculada mediante ECOLEGO™, de los Factores de Conversión de Dosis (DCF) para varios radionucleidos críticos (como C-14, Cl-36, I-129, Cs-135, Ra-226, Th-230 y U-238) a lo largo de un período de simulación de 10,000 años. Reflejando cómo la desintegración radiactiva y la formación de progenie afectan la dosis potencial con el tiempo.



**Figura 4.23. Factores de conversión de dosis calculados para varios radionucleidos y escenarios.**  
**Fuente: Pohjola et al., 2019.**

Los resultados obtenidos mediante ECOLEGO™ demostraron que los parámetros físicos de la estructura del sedimento, como la densidad aparente y el grosor, son los que más contribuyen a la dosis total recibida por los humanos en este tipo de eventos (Pohjola et al., 2019). Este caso de aplicación ilustra de manera práctica cómo el análisis probabilístico del software es indispensable en estudios donde la variabilidad del entorno y la alta incertidumbre paramétrica exigen superar las limitaciones de los modelos puramente deterministas.

#### 4.15 Softwares especializados en simulación de explosiones y dispersión de gases

Finalmente, FLACS™ se posiciona como una herramienta especializada en la simulación tridimensional de explosiones, incendios y dispersión de gases mediante dinámica de fluidos computacional (CFD). Su capacidad para representar geometrías complejas y condiciones reales de instalaciones industriales lo convierte en un software clave para estudios de seguridad mayor y cumplimiento normativo. No obstante, su elevado costo computacional y la necesidad de personal altamente capacitado restringen su uso a proyectos de gran escala y análisis especializados.

En el ámbito de la validación científica de esta herramienta, destaca el análisis exhaustivo realizado por Middha (2010), quien evaluó el desempeño de FLACS específicamente para estudios

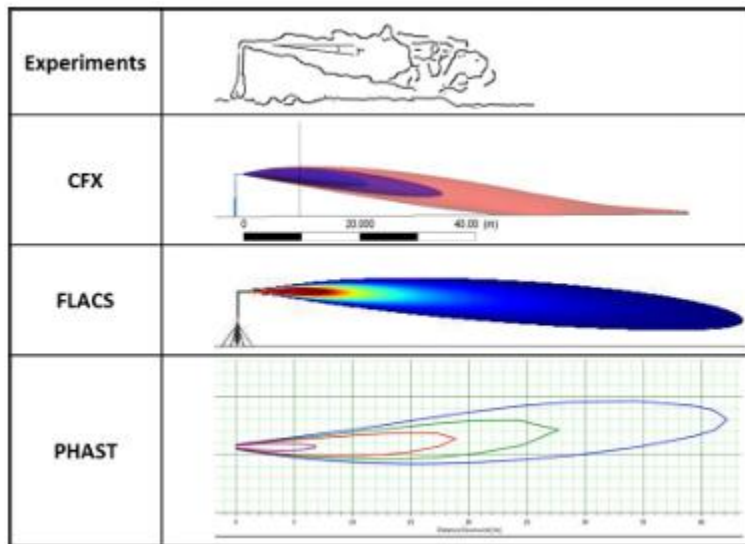
de seguridad con hidrógeno. En su investigación, se analizó la capacidad del software para predecir la dispersión de gases livianos y la propagación de explosiones en entornos congestionados, comparando los resultados simulados con datos experimentales a gran escala.

El análisis de Middha demostró que la metodología de "porosidad distribuida" utilizada por FLACS™ permite representar adecuadamente la influencia de obstáculos geométricos sub-rejilla (como tuberías y equipos menores) en la aceleración de la llama y la generación de turbulencia, factores críticos que los modelos simplificados suelen omitir. Asimismo, se confirmó que el software ofrece predicciones precisas sobre la estratificación y acumulación de gas en espacios parcialmente confinados, como garajes o túneles, proporcionando directrices esenciales para el diseño de sistemas de ventilación y mitigación en infraestructuras críticas. Sin embargo, el autor también advierte sobre las limitaciones del código en la predicción determinista de la transición de deflagración a detonación (DDT), sugiriendo que, para estos fenómenos extremos, los resultados deben interpretarse como indicadores de probabilidad basados en gradientes de presión espacial.

Ampliando el espectro de validación hacia aplicaciones industriales más diversas, resulta relevante el trabajo desarrollado por Quillatre (2017), en el cual se evalúa el desempeño de distintos modelos de simulación para la predicción de la dispersión de vapores de gas natural licuado (GNL) en condiciones reales. El estudio compara los resultados obtenidos mediante softwares CFD como FLACS™ y ANSYS-CFX™, así como el modelo simplificado PHAST™, frente a datos experimentales provenientes de pruebas a escala real realizadas en la terminal de GNL de Montoir-de-Bretagne, Francia

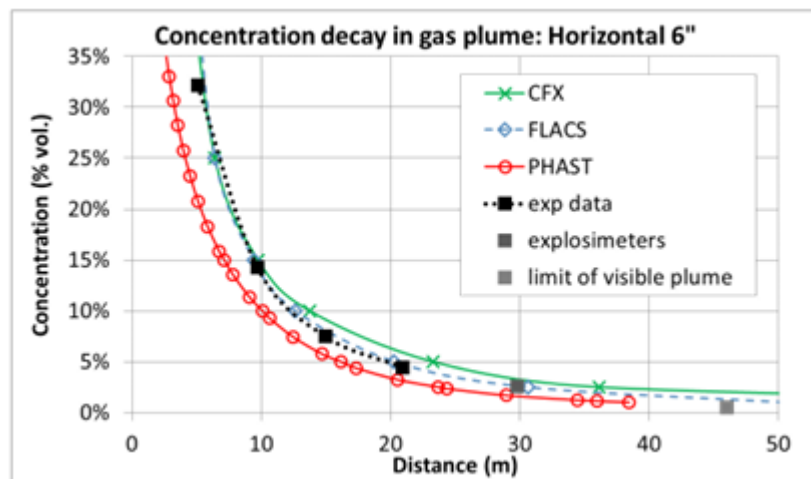
Los resultados del análisis muestran que los modelos CFD presentan una capacidad significativamente superior para reproducir el comportamiento físico de nubes de gas frío y denso, particularmente en escenarios donde existen fuertes gradientes térmicos y de densidad. En los ensayos evaluados, FLACS™ y CFX™ lograron predecir adecuadamente fenómenos observados experimentalmente, como la caída gravitacional del penacho de gas y la influencia de la velocidad del viento y del diámetro de la descarga en la dispersión del contaminante. En contraste, el modelo PHAST™ mostró limitaciones importantes al no reproducir la caída del penacho, asumiendo un comportamiento ascendente típico de gases ligeros a temperatura ambiente, lo que conduce a una subestimación de las distancias de riesgo.

La Figura 4.24 muestra vistas laterales de la columna de gas, observada con una cámara infrarroja (arriba) y calculada con ANSYS-CFX™, FLACS™ y PHAST™. FLACS™ y CFX™ arrojan columnas de gas similares a la observada experimentalmente, con una caída algunos metros después del punto de liberación. Por el contrario, PHAST™ no predice la caída de la columna de gas y muestra un despegue que puede relacionarse con el comportamiento clásico de una columna de metano puro cuando el gas se encuentra inicialmente a temperatura ambiente.



**Figura 4.24.** Trayectoria de la columna de arriba a abajo – liberación horizontal de 6” de diámetro.  
**Fuente:** Quillatre, 2017.

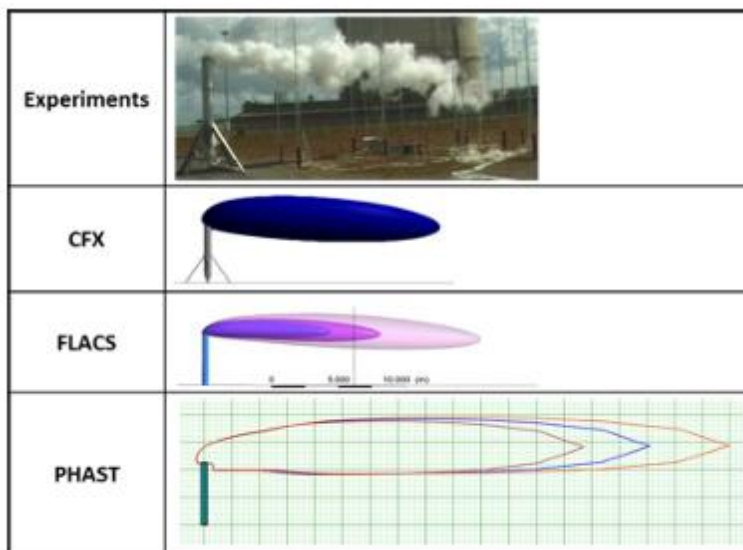
La Figura 4.25 las simulaciones con FLACS™ y CFX arrojan resultados muy buenos y cercanos. FLACS™ y CFX™ arrojan un error de -1 % y +20 %. Por el contrario, PHAST™ sobreestima la disipación de gas, lo que resulta en concentraciones subestimadas tanto en campo cercano como en campo lejano.



**Figura 4.25.** Disminución de la concentración en la columna de gas – liberación horizontal de 6” de diámetro. **Fuente:** Quillatre, 2017.

La Figura 4.26 muestra las trayectorias de las columnas obtenidas con las diferentes herramientas de modelado. Las observaciones coinciden con resultados previos: se observan trayectorias de columnas bastante similares con CFD y en experimentos. Sin embargo, la columna de gas modelada con CFX™ desciende más rápidamente que la modelada con FLACS™ y parece ser

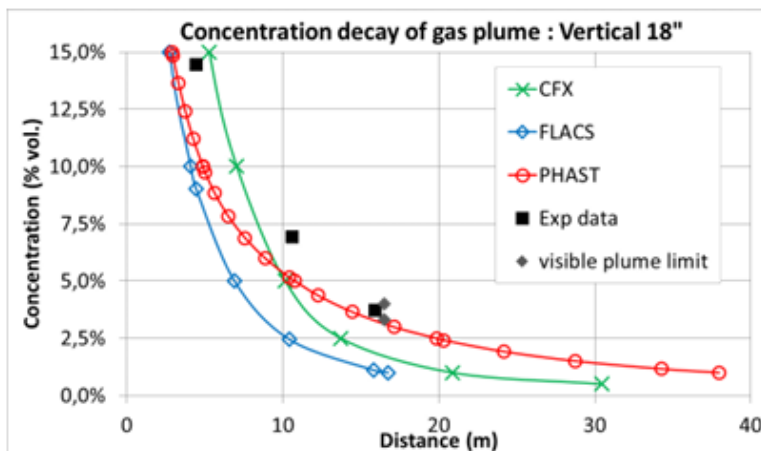
más representativa de la observación experimental. PHAST™ no predice la caída de la columna de gas.



**Figura 4.26. Trayectoria de la columna proporcionada de arriba a abajo – diámetro vertical de 18".**  
**Fuente: Quillatre, 2017.**

La Figura 4.27 muestra la disminución de la concentración en la columna de gas, calculada por FLACS™, CFX™ y PHAST™, en comparación con los datos experimentales. Las conclusiones obtenidas aquí difieren considerablemente de los resultados previos.

Los resultados obtenidos con FLACS™ y CFX™ son relativamente similares (excepto en el campo muy cercano, donde FLACS™ proporciona concentraciones más bajas que CFX™), pero tienden a subestimar las distancias de riesgo tanto en el campo cercano como en el campo lejano.



**Figura 4.27. Disminución de la concentración en la columna de gas – liberación vertical de 18" de diámetro. Fuente: Quillatre, 2017.**

En términos cuantitativos, el estudio evidencia que FLACS™ proporciona estimaciones razonables de las distancias asociadas al Límite Inferior de Inflamabilidad (LFL), aunque tiende a subestimar las concentraciones en campo lejano, especialmente en liberaciones de mayor diámetro y caudal. Esta subestimación se ve fuertemente influenciada por la definición del término fuente y por la discretización espacial empleada en el modelo.

Los resultados presentados confirman que FLACS™ es una herramienta robusta para el análisis de dispersión de gases en escenarios industriales complejos, siempre que se apliquen buenas prácticas de modelado y se interpreten los resultados dentro de un marco probabilístico. No obstante, el estudio también pone de manifiesto que, para análisis detallados de dispersión atmosférica de gases fríos o de bajo impulso, los códigos CFD de propósito general como ANSYS-CFX™ pueden ofrecer mayor precisión, aunque a costa de un mayor esfuerzo computacional y de modelación. Estas conclusiones refuerzan la importancia de seleccionar el software de simulación en función del tipo de fenómeno analizado, el nivel de detalle requerido y la etapa del estudio de riesgo.

En continuidad con el análisis presentado anteriormente, resulta necesario evaluar las herramientas de simulación utilizadas para modelar escenarios de liberación y dispersión de sustancias peligrosas.

Se analizó el trabajo escrito de Guddal en 2025 para su tesis de maestría donde se hizo la comparación entre FLACS-CFD™ y PHAST™ para la simulación de liberaciones y dispersión atmosférica de amoníaco, utilizando como referencia datos experimentales a gran escala obtenidos por INERIS. El amoníaco, aunque es un vector energético prometedor por su potencial como combustible libre de carbono, representa un riesgo significativo debido a su toxicidad y a su comportamiento como gas denso tras una liberación accidental, lo que hace indispensable el uso de modelos de simulación confiables en estudios de riesgo.

Desde el punto de vista de la simulación, el estudio muestra que PHAST™, basado en modelos integrales y empíricos, ofrece buenos resultados en escenarios simples y terrenos planos, con la ventaja de un bajo costo computacional (ver Figura 4.28). Sin embargo, su principal limitación es la incapacidad de modelar explícitamente obstáculos y topografía, lo que reduce su precisión en entornos industriales complejos.

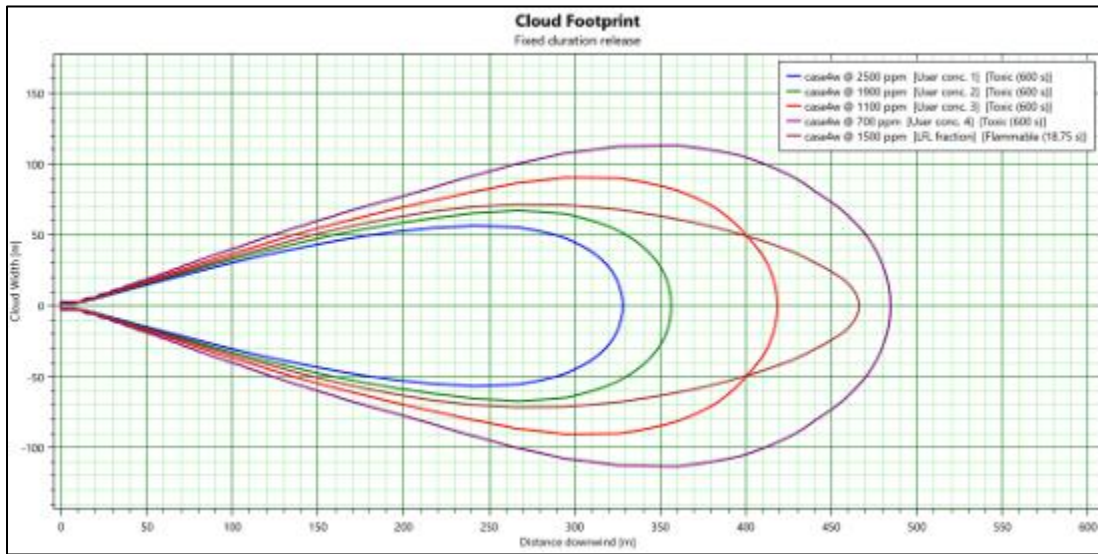


Figura 4.28. Gráfica de la dispersión de amoníaco del ensayo de PHAST™ en 2D. Fuente: Guddal, 2025.

En contraste, FLACS-CFD™, al emplear dinámica de fluidos computacional, permite representar de manera detallada la geometría, los obstáculos y la turbulencia atmosférica. Aunque requiere mayor esfuerzo computacional y una correcta definición de malla, el software muestra una mejor correlación con los datos experimentales en escenarios con obstrucciones y configuraciones complejas, especialmente en la zona cercana a la fuente de liberación (ver de la Figura 4.29 a la Figura 4.31).

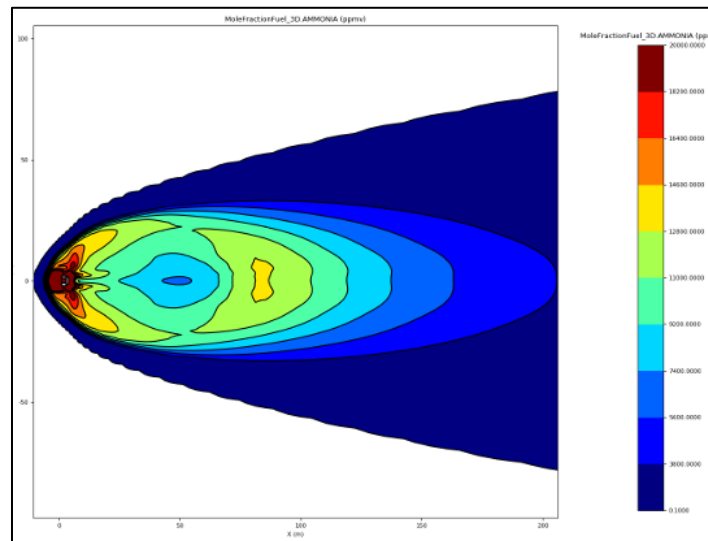


Figura 4.29. Gráfica de la dispersión de amoníaco del ensayo de FLACS™ en 2D. Fuente: Guddal, 2025.

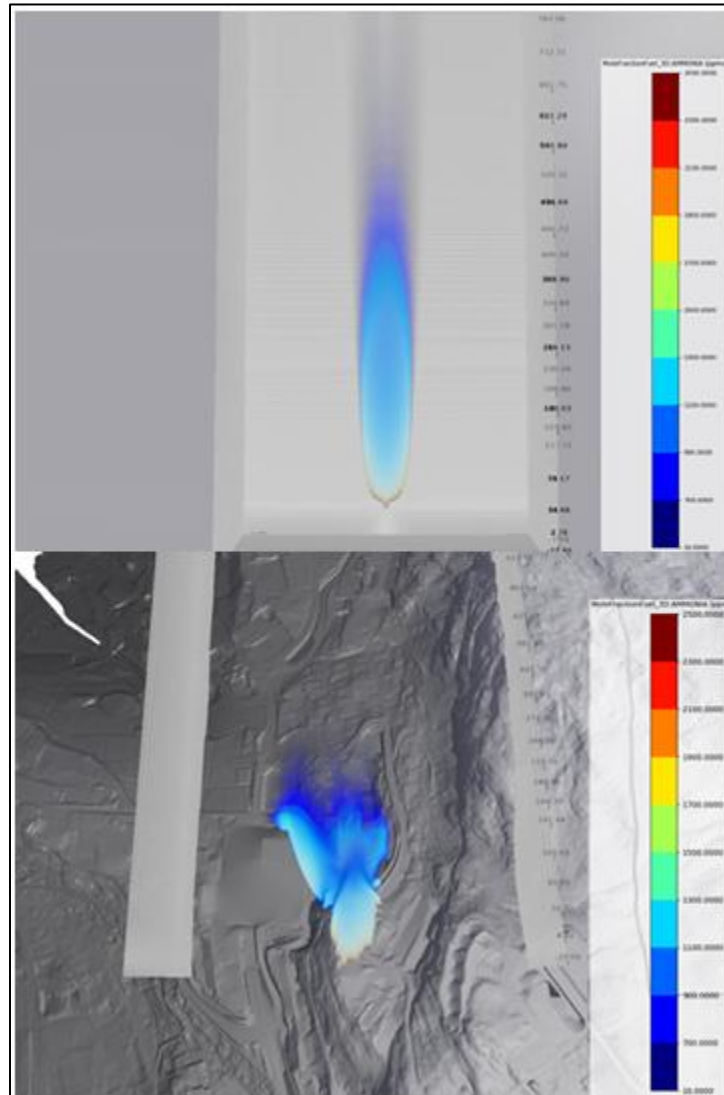
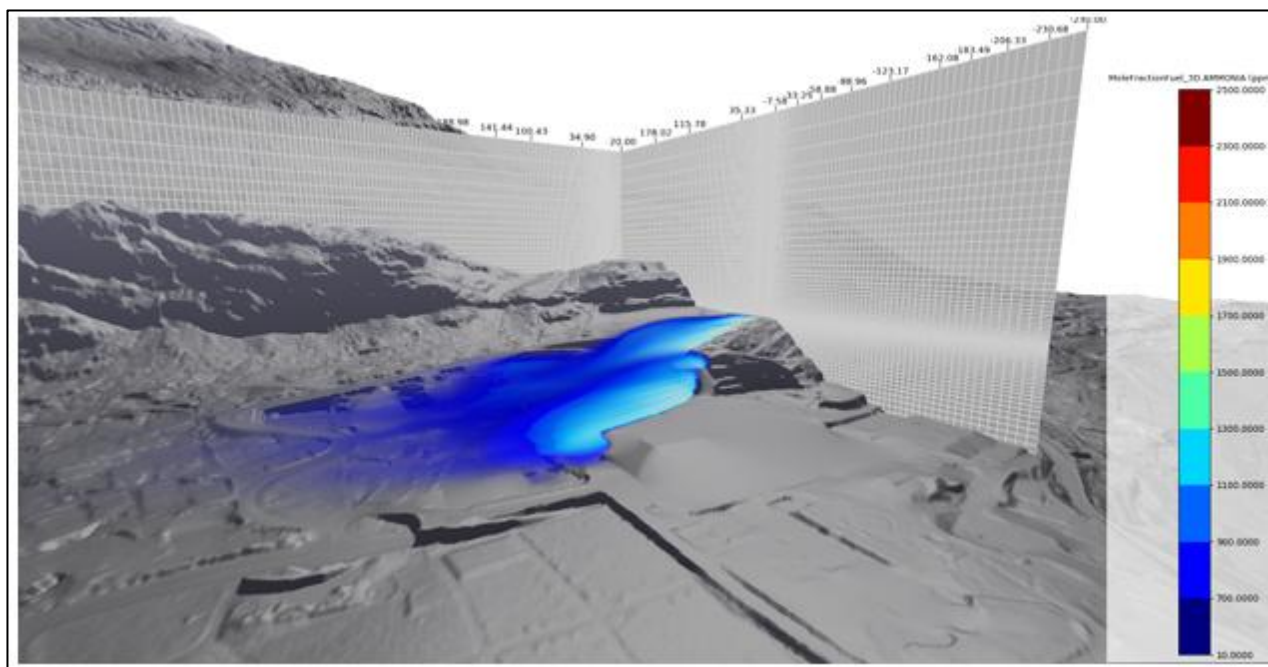


Figura 4.30. Visualización 3D que compara la dispersión de amoníaco con el terreno plano de la parte superior y la topografía de Bergen en FLACS™. Fuente: Guddal, 2025.



**Figura 4.31. Gráfico 3D de los efectos topográficos sobre la dispersión de amoníaco desde una perspectiva lateral en FLACS™. Fuente: Guddal, 2025.**

Por lo cual dentro del análisis de sensibilidad destaca que parámetros como la clase de estabilidad atmosférica y la rugosidad del terreno influyen de forma decisiva en los resultados de ambos modelos. El estudio concluye que la elección del software debe basarse en la complejidad del escenario y el nivel de detalle requerido, siendo PHAST™ adecuado para evaluaciones rápidas y FLACS-CFD™ más apropiado para simulaciones avanzadas de dispersión de gases y análisis de consecuencias en estudios de seguridad industrial.

## 4.2 Comparación

Tras examinar individualmente las características técnicas de cada programa en el capítulo anterior, resulta necesario contrastar sus prestaciones operativas de manera directa. La Tabla 4.1 presenta una comparativa general que clasifica a los softwares evaluados según su motor de cálculo y metodología principal. En esta matriz se sintetizan las fortalezas críticas frente a sus limitaciones inherentes, tales como costos de licencias o restricciones en la modelación de terrenos complejos. El objetivo de esta tabulación es identificar el ámbito de aplicación ideal para cada herramienta, evidenciando que la elección del software depende intrínsecamente de la fase del proyecto y del nivel de rigor termodinámico requerido.

**Tabla 4.1. Tabla comparativa 1 de los softwares.**

Software	Metodología	Fortalezas Clave	Limitaciones Principales	Ámbito Ideal
PHAST™	Modelos integrales y empíricos	Análisis integral de consecuencias (fuego, explosión, tóxico); validado para QRA y LOPA.	No modela explícitamente obstáculos 3D ni topografía compleja; costo elevado.	Grandes industrias de riesgo mayor, consultoría especializada.
ALOHA™	Modelo Gaussiano / Gas denso	Gratuito; respuesta rápida en emergencias; ideal para zonas de amenaza preliminares.	No modela incendios horizontales, ni mezclas complejas, ni efectos de obstáculos.	Protección Civil, respuesta inmediata, capacitación.
FLACS™	CFD (Dinámica de Fluidos Computacional)	Alta precisión en geometrías congestionadas (obstáculos); simulación detallada de explosiones y dispersión.	Alto costo computacional y de licencia; requiere definición de malla compleja.	Análisis forense de accidentes, diseño de plataformas offshore, hidrógeno.
Aspen Plus™	Ecuaciones de Estado / Termodinámica Rigurosa	Estándar en balance de masa/energía; optimización de plantas enteras; escalamiento de procesos.	Enfoque en estado estacionario; no simula la dispersión atmosférica externa.	Diseño de ingeniería, petroquímica, optimización energética.
Aspen HYSYS™	Simulación Dinámica	Especializado en hidrocarburos; modela transitorios (arranques/paradas/alivios).	Costoso; interfaz y termodinámica enfocadas mayormente en Oil & Gas.	Refinerías, procesamiento de gas, análisis de alivio de presión.
DWSIM™	Código Abierto / CAPE-OPEN	Gratuito y accesible; precisión <5% vs comerciales en operaciones estándar.	Menor soporte técnico; funciones avanzadas limitadas comparado con Aspen.	Academia, PYMES, investigación inicial.
COMSOL™	Elemento Finito / Multifísica	Acoplamiento de fenómenos (química + fluido + calor + eléctrico).	Curva de aprendizaje muy alta; requiere formulación matemática avanzada.	I+D, diseño de reactores, electroquímica, corrosión.
Ecolego™	Probabilístico / Compartimental	Manejo avanzado de incertidumbre y análisis de sensibilidad; evaluación de impacto ambiental.	Aplicación limitada en diseño de procesos industriales directos (tuberías/equipos).	Evaluación de riesgo ambiental y radiológico.

**Fuente: Elaboración propia.**

En la Tabla 4.2 se observa que los softwares pueden agruparse según su propósito principal. PHAST™ y ALOHA™ se orientan directamente al análisis de consecuencias de accidentes químicos, diferenciándose principalmente en el nivel de complejidad y precisión. Los simuladores de procesos como ASPEN PLUS™, ASPEN HYSYS™ y DWSIM™ aportan valor en la prevención de riesgos desde la etapa de diseño y operación segura, mientras que COMSOL MULTIPHYSICS™ y FLACS™ permiten un análisis detallado de fenómenos complejos y escenarios de alta severidad. Finalmente, ECOLEGO™ complementa estos enfoques mediante la incorporación de incertidumbre y análisis probabilístico, fortaleciendo la evaluación integral del riesgo.

**Tabla 4.2. Tabla comparativa 2 de los softwares.**

Software	Tipo de análisis	Enfoque principal	Nivel de detalle	Complejidad de uso	Aplicaciones típicas
<b>PHAST™</b>	Consecuencias y riesgo cuantitativo	Dispersión, incendios, explosiones y toxicidad	Alto	Alta	QRA, HAZOP, HAZID, planeación de emergencias, diseño de instalaciones
<b>ALOHA™</b>	Consecuencias simplificadas	Respuesta a emergencias y zonas de amenaza	Medio	Baja	Protección civil, simulacros, capacitación, respuesta inmediata
<b>ASPEN PLUS™</b>	Simulación de procesos	Diseño y optimización en estado estacionario	Alto	Alta	Diseño de plantas químicas, balances de masa y energía, escalamiento
<b>ASPEN HYSYS™</b>	Simulación de procesos dinámicos	Procesos de hidrocarburos y análisis transitorio	Alto	Alta	Arranques y paradas, análisis operativo, estudios de seguridad
<b>DWSIM™</b>	Simulación de procesos	Diseño y análisis preliminar	Medio	Media	Educación, investigación, estudios conceptuales
<b>COMSOL MULTIPHYSICS™</b>	Simulación multifísica	Fenómenos acoplados (flujo, calor, reacción)	Muy alto	Muy alta	Procesos complejos, hotspots, dispersión avanzada, electroquímica

Software	Tipo de análisis	Enfoque principal	Nivel de detalle	Complejidad de uso	Aplicaciones típicas
<b>ECOLEGO™</b>	Análisis probabilístico	Incertidumbre y riesgo dinámico	Medio–Alto	Media–Alta	Evaluación ambiental, análisis de sensibilidad, riesgo a largo plazo
<b>FLACS™</b>	CFD tridimensional	Explosiones, incendios y dispersión de gases	Muy alto	Muy alta	Seguridad mayor, instalaciones complejas, cumplimiento normativo

Fuente: Elaboración propia.

La confiabilidad de los resultados en un análisis de riesgo está determinada por la metodología matemática subyacente en cada software. La Tabla 4.3 clasifica las herramientas estudiadas jerárquicamente según su nivel de detalle y enfoque computacional, abarcando desde modelos gaussianos simplificados hasta códigos avanzados de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) y métodos probabilísticos. Esta estratificación es fundamental para entender la relación entre el costo computacional y la precisión de la simulación, destacando cómo softwares de nivel intermedio basados en modelos integrales pueden ser suficientes para terrenos planos, mientras que escenarios con alta congestión o incertidumbre paramétrica requieren necesariamente enfoques de nivel avanzado o probabilístico.

**Tabla 4.3. Tabla comparativa 3 de los softwares.**

Nivel de Detalle	Metodología Matemática	Softwares Representativos	Descripción de la Aplicación
Nivel 1: Simplificado	Modelos Gaussianos y Tablas de Distancia	ALOHA™	Estimación rápida, asume terreno plano y viento constante. Útil para respuesta inmediata.
Nivel 2: Intermedio	Modelos Integrales / Ecuaciones de Estado	PHAST™, DWSIM™, Aspen™	PHAST usa modelos validados para consecuencias. Aspen/DWSIM usan termodinámica rigurosa para el interior de equipos.
Nivel 3: Avanzado	CFD (Navier-Stokes) / Elemento Finito	FLACS™, COMSOL™	Resolución de ecuaciones de fluido en celdas tridimensionales. Considera turbulencia por obstáculos y topografía.

Nivel de Detalle	Metodología Matemática	Softwares Representativos	Descripción de la Aplicación
Nivel 4: Probabilístico	Monte Carlo / Hiper cubo Latino	ECOLEGO™	Evalúa la incertidumbre de los parámetros a lo largo del tiempo, ideal para riesgos ambientales a largo plazo.

Fuente: Elaboración propia.

La Tabla 4.3 funciona como una lista de verificación técnica que cruza los softwares analizados con los principales eventos peligrosos de la industria, tales como dispersión de nubes tóxicas, explosiones de nubes de vapor (VCE) e incendios tipo Jet Fire o Pool Fire. Esta comparación permite distinguir claramente entre aquellas herramientas diseñadas para la prevención interna del proceso y aquellas especializadas en la modelación de consecuencias externas y la interacción con obstáculos tridimensionales y topografía.

**Tabla 4.4. Tabla comparativa 4 de los softwares.**

Capacidad / Fenómeno	PHAST™	ALOHA™	FLACS™	COMSOL™	Aspen/DWSIM*
Dispersión de Gases (Nube Tóxica)	Sí (2D/Graf)	Sí (2D/Mapas)	Sí (3D Complejo)	Sí (Multifísica)	No (Interno en tubería)
Explosiones (VCE / Onda Expansiva)	Sí (Modelos Empíricos)	Sí (Estimación Zonas)	Sí (Detallado CFD)	Requiere Configuración	No
Incendios (Jet / Pool / Fireball)	Sí (Todos)	Sí (Limitado)	Sí (Detallado)	Calor y Reacción	No
Interfaz y Visualización 3D	Gráficas/Simple	No (Mapas 2D)	Sí (Geometría Real)	Sí (Geometría Real)	Diagramas de Flujo (PFD)
Efecto de Obstáculos/Edificios	Simplificado	No	Sí (Crucial)	Sí (Crucial)	No
Modelado de Fugas en Tubería	Término Fuente	Parámetros Fuga	Término Fuente	CFD Flujo	Balance Masa/Energía

Fuente: Elaboración propia.

## CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES.

El presente trabajo permitió analizar de manera integral la problemática asociada a los riesgos químicos en la industria y la relevancia del uso de software de simulación como herramienta fundamental para su evaluación, prevención y mitigación. A lo largo del desarrollo de la investigación se evidenció que los peligros químicos, inherentes a múltiples actividades industriales, pueden generar consecuencias graves para la salud humana, el medio ambiente y la infraestructura, por lo que su adecuada gestión constituye una prioridad dentro de los sistemas modernos de seguridad industrial. En este contexto, la simulación computacional se posiciona como un recurso clave para anticipar escenarios de accidente, evaluar sus posibles impactos y apoyar la toma de decisiones técnicas de manera informada y objetiva.

El desarrollo de esta investigación permite concluir que la gestión de riesgos químicos en la industria moderna ha evolucionado de ser una tarea puramente reactiva a una disciplina esencialmente predictiva, donde la simulación computacional funge como el eje rector. Se ha evidenciado que la diversidad de peligros que abarcan desde fugas tóxicas hasta explosiones de nubes de vapor exige un abanico igualmente diverso de herramientas tecnológicas, confirmando que no existe un software universal capaz de cubrir todas las necesidades industriales; por el contrario, la eficacia de la prevención radica en la selección estratégica de la herramienta en función de la etapa del proyecto, la complejidad del entorno y el rigor termodinámico requerido.

Desde la perspectiva de la Ingeniería Civil, el análisis de riesgos químicos cobra especial relevancia en el diseño y operación de infraestructura industrial, transporte de materiales peligrosos, gasoductos, refinerías y zonas urbanas cercanas a instalaciones de alto riesgo. La correcta aplicación de herramientas de simulación permite evaluar escenarios de afectación sobre la población, estructuras y medio ambiente, contribuyendo a un diseño más seguro y resiliente.

El dominio de estos softwares fortalece su participación en equipos multidisciplinarios, particularmente en estudios de impacto, planeación territorial, diseño de obras de protección y elaboración de planes de emergencia. Por lo tanto, la incorporación de estas herramientas en la formación académica representa una ventaja competitiva y una necesidad técnica ante los retos actuales de la industria.

La revisión del estado del arte y el análisis de antecedentes históricos de accidentes químicos, tanto a nivel internacional como nacional, permitió constatar que una gran proporción de estos eventos pudieron haberse mitigado o incluso evitado mediante una evaluación adecuada de riesgos y una correcta planificación de medidas preventivas. Herramientas como PHAST™ y ALOHA™ destacan por su utilidad en la simulación de fugas, dispersiones, incendios y explosiones, siendo especialmente valiosas para la planeación de emergencias y la delimitación de zonas de riesgo. Por otro lado, simuladores de procesos como ASPEN PLUS™, ASPEN HYSYS™ y DWSIM™ permiten analizar de forma detallada el comportamiento termodinámico y operativo de sistemas industriales, contribuyendo al diseño seguro y eficiente de plantas químicas y energéticas.

Asimismo, el estudio de plataformas avanzadas como COMSOL MULTIPHYSICS™ y ECOLEGO™ evidenció el potencial de la simulación multifísica y probabilística para abordar fenómenos complejos que involucran múltiples variables y altos niveles de incertidumbre. Estas herramientas resultan particularmente relevantes en la evaluación de impactos ambientales, el análisis de incertidumbre y la modelación de procesos dinámicos, donde los enfoques tradicionales pueden resultar insuficientes. De igual forma, software especializado como FLACS™ demostró su importancia en la simulación tridimensional de explosiones y dispersiones de gases, ofreciendo un alto nivel de detalle para la evaluación de consecuencias en instalaciones industriales complejas.

Uno de los hallazgos más relevantes de este estudio comparativo es la validación de una metodología escalonada de análisis que optimiza recursos y tiempos. Herramientas como ALOHA™ demostraron ser indispensables para una respuesta inmediata y para la delimitación preliminar de zonas de amenaza en terrenos llanos, funcionando como un primer filtro ideal para la gestión de emergencias en tiempo real por parte de protección civil. Sin embargo, para los escenarios críticos identificados en este cribado inicial, resulta imperativo transitar hacia herramientas de modelado detallado como PHAST™. Los estudios analizados, como los de Saturnino (2024) y Bhattacharya y Kumar (2015), confirman que PHAST™ supera las limitaciones de los modelos gaussianos simples al permitir la simulación de incendios complejos, como los *jet fires* horizontales, y rupturas catastróficas, validando así que la estrategia óptima no es la elección excluyente entre un software gratuito y uno comercial, sino su integración en fases consecutivas.

De esta forma, la investigación evidenció una limitación crítica en los modelos integrales: la subestimación de riesgos en entornos congestionados. Se concluye que, para instalaciones con alta densidad de tuberías, obstáculos o topografía compleja, el uso de software basado en Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), como FLACS™ o COMSOL MULTIPHYSICS™, no es opcional, sino necesario. Tal como demostraron las investigaciones de Guddal (2025) y Quillatre (2017), solo los modelos CFD logran predecir con exactitud fenómenos como la acumulación de gas en espacios confinados o la caída gravitacional de nubes densas en sustancias como el amoníaco, variables que los modelos simplificados omiten y que podrían comprometer la seguridad del diseño en escenarios de alta complejidad geométrica. En el ámbito de la prevención desde el diseño, se concluye que el software de código abierto DWSIM™ ha alcanzado un nivel de madurez técnica suficiente para competir con estándares comerciales en operaciones unitarias fundamentales. Al validar desviaciones menores al 5% en variables críticas frente a softwares consolidados como ASPEN PLUS™ y ASPEN HYSYS™, se establece que DWSIM™ representa una alternativa viable y potente para la academia, PYMES y etapas conceptuales de ingeniería.

De la comparación entre los distintos programas de cómputo se concluye que no existe una herramienta única que cubra la totalidad de los escenarios y necesidades del análisis de riesgos químicos. Cada software presenta ventajas específicas en función de su enfoque, nivel de detalle, requerimientos computacionales y costos de implementación. Por ello, la selección del programa adecuado debe realizarse considerando el tipo de proceso, las sustancias involucradas, el objetivo del estudio y la disponibilidad de información confiable. En muchos casos, el uso complementario de varias herramientas representa la estrategia más adecuada para obtener resultados robustos y confiables.

Finalmente, se emiten recomendaciones clave para la industria y la formación académica. Es fundamental promover una integración curricular donde los planes de estudio de ingeniería no se limiten a la enseñanza operativa de un solo software, sino que formen al ingeniero en el criterio de selección. Además, se recomienda priorizar la prevención sobre la mitigación mediante el uso temprano de simuladores de proceso para identificar condiciones inseguras desde el balance de masa y energía, antes de depender únicamente de los modelos de consecuencias. Además, para evaluaciones de impacto ambiental a largo plazo, se sugiere complementar los modelos deterministas con herramientas probabilísticas como ECOLEGO™, asegurando que la incertidumbre de los parámetros no comprometa la seguridad del proyecto. En definitiva, la seguridad industrial no depende del software más costoso, sino de la capacidad del ingeniero para orquestar estas herramientas de manera complementaria, asegurando que cada fase del ciclo de vida de la planta esté respaldada por el modelo matemático más adecuado. El uso de herramientas de simulación no solo contribuye a la reducción de accidentes químicos y al cumplimiento normativo, sino que también promueve una cultura de prevención, optimización de recursos y sostenibilidad. En consecuencia, la aplicación adecuada de estos programas de cómputo representa un elemento clave para el desarrollo de una industria más segura, responsable y alineada con los principios del desarrollo sostenible.

## BIBLIOHEMEROGRAFÍA

- Arnaudov, A. (2024). What is the Difference Between PHA, HAZOP & LOPA? Sphera. <https://sphera.com/resources/glossary/what-is-the-difference-between-pha-hazop-lop/>
- AspenTech. (s.f.). *Aspen HYSYS: Introduction to Modeling*. Aspen Technology, Inc. Recuperado de [https://esupport.aspentech.com/T\\_course?id=a3p0B0000004YqtQAE](https://esupport.aspentech.com/T_course?id=a3p0B0000004YqtQAE)
- AspenTech. (2025). Aspen HYSYS FCC Reactor Model | Fluid Catalytic Cracking Simulation | Petrochemical Applications. <https://www.aspentech.com/en/resources/video/v15-aspen-hysys-new-fcc-reactor-model>
- AspenTech. (2025). Aspen Plus | Leading Process Simulation Software. <https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspen-plus>
- Avila, R. (2013). Application of Ecolego in assessments of risks from contaminated lands [Diapositivas de Power Point]. Organismo Internacional de Energía Atómica. <https://www-ns.iaea.org/downloads/rw/projects/emras/emras-two/first-technical-meeting/second-working-group-meeting/working-group-presentations/workgroup2-presentations/presentaiton-wg2-ecolego-tool.pdf>
- Bhattacharya, R., & Kumar, V. G. (2015). Consequence analysis for simulation of hazardous chemicals release using ALOHA software. *International Journal of ChemTech Research*, 8(4), 2038–2046. [https://www.researchgate.net/publication/283100654\\_Consequence\\_analysis\\_for\\_simulation\\_of\\_hazardous\\_chemicals\\_release\\_using\\_ALOHA\\_software](https://www.researchgate.net/publication/283100654_Consequence_analysis_for_simulation_of_hazardous_chemicals_release_using_ALOHA_software)
- Carvajal, A. (2018). *Los 9 Peores Desastres De La Industria Química - Innova*. Innova. <https://www.innovaambiental.com.co/los-9-peores-desastres-de-la-industria-quimica/>
- CENAPRED. (2006). *Guía Básica para la Elaboración de Atlas Estatales y Municipales de Peligros y Riesgo*. <https://www.cenapred.unam.mx/es/Publicaciones/archivos/56.pdf>
- COMSOL (2026). The COMSOL® Software Product Suite. COMSOL. <https://www.comsol.com/products>
- ComparaSoftware México. (s. f.). Aspen HYSYS: Precios, funciones y opiniones [2025]. ComparaSoftware. <https://www.comparasoftware.com/aspen-hysys#:~:text=%C2%BFQu%C3%A9%20es%20Aspen%20HYSYS?,trabajos%20con%20procesos%20industriales%20complejos>.
- Contreras, G. (2023). Riesgo químico: identificar y prevenir los riesgos relacionados con las sustancias químicas. Blog-Qhse.com. <https://doi.org/10277344/1643211205397>
- Cullen, W. D. (1990). *The Public Inquiry into the Piper Alpha Disaster* (Vol. 1). H.M. Stationery Office. <https://www.hse.gov.uk/offshore/piper-alpha-disaster-public-inquiry.htm>
- Debusmann, B., Jr. (2023, February 24). Derrame tóxico: cerca de 45.000 animales murieron después del descarrilamiento de un tren en Ohio a primeros de mes. BBC News Mundo. <https://www.bbc.com/mundo/noticias-internacional-64753203>
- Department of Chemical Engineering. (s.f.). *ASPEN PLUS - Course Instructional Tutorials*. University of Washington. Recuperado de [http://courses.washington.edu/overney/ASPEN\\_Cover\\_Index.htm](http://courses.washington.edu/overney/ASPEN_Cover_Index.htm)

- DNV (2025). Digital Solutions - Plant product videos. <https://www.dnv.com/software/consequence-analysis-gra-product-videos/>
- Dudu, V. P., Ilunga, M., Chabalala, D. T., & Mathuthu, M. (2025). Dose Assessment in Mining Communities in South Africa Using Ecolego Simulation Software. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 23(1), 3. <https://doi.org/10.3390/ijerph23010003>
- DWSIM (2025). Open-Source Chemical Process Simulator. Dwsim.org. <https://dwsim.org/>
- ECOLEGO (2003). A toolbox for radio ecological risk assessment, *Proceedings of the International Conference on the Protection from the Effects of Ionizing Radiation*, IAEA-CN-109/80. Stockholm: International Atomic Energy Agency. 229 - 232. [https://www-pub.iaea.org/MTCD/Publications/PDF/Pub1229\\_web.pdf](https://www-pub.iaea.org/MTCD/Publications/PDF/Pub1229_web.pdf)
- EPA. (2025). ALOHA Software US EPA. <https://www.epa.gov/cameo/aloha-software>
- FOSSEE. (s.f.). *DWSIM Flowsheeting Project*. Indian Institute of Technology Bombay. <https://dwsim.fossee.in/>
- Gexcon. (2025). Gexcon. Latest Version of FLACS. <https://www.gexcon.com/software/flacs/latest-version/>
- Guddal, M. (2025). *Validation and comparative analysis of FLACS-CFD and Phast for ammonia release and dispersion* (Master's thesis, University of Bergen).
- Kingsley Eke. (2015). Aspen Hysys Process simulation video [Video]. YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=PZqP8sOWDAY>
- Kramer, A. (2023). *In the Matter of DNV Petitioner: Final Decision* (PHMSA Docket No. 2021-0041). U.S. Department of Transportation. <https://www.phmsa.dot.gov/sites/phmsa.dot.gov/files/2023-05/Final%20Decision%20-%20Phast%208.4.pdf>
- Krisanangkura, P., Itthipoonthanakorn, T., & Udomsomporn, S. (2013). Environmental dose assessment using Ecolego: case study of soil from Japan. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*. [https://www.researchgate.net/publication/257611866\\_Environmental\\_dose\\_assessment\\_using\\_Ecolego\\_Case\\_study\\_of\\_soil\\_from\\_Japan](https://www.researchgate.net/publication/257611866_Environmental_dose_assessment_using_Ecolego_Case_study_of_soil_from_Japan)
- Kwanchanok Tangsriwong, Puttida Lapchit, Tanatip Kittijungjit, Thepparat Klamrassamee, Yanin Sukjai, & Yossapong Laonual. (2020). Modeling of chemical processes using commercial and open-source software: A comparison between Aspen Plus and DWSIM. *IOP Conference Series Earth and Environmental Science*, 463(1), 012057–012057. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/463/1/012057>
- Middha, P. (2010). Development, use and validation of the CFD tool FLACS for hydrogen safety studies [Tesis doctoral, Universidad de Bergen]. Repositorio Institucional de la Universidad de Bergen. <https://nva.sikt.no/registrasjon/0198cc8a62f2-57d105eb-f30e-4d9e-b621-490603f01320>
- NPTEL. (2023). *Aspen Plus - Certification Course*. National Programme on Technology Enhanced Learning; SWAYAM. Recuperado de [https://onlinecourses.nptel.ac.in/noc26\\_ch16/preview](https://onlinecourses.nptel.ac.in/noc26_ch16/preview)
- Office of Response and Restoration, National Oceanic and Atmospheric Administration. (2012). *ALOHA's limitations*. U.S. Department of Commerce.

- <https://response.restoration.noaa.gov/oil-and-chemical-spills/chemical-spills/response-tools/alohas-limitations.html>
- Özay, M. E., Güzel, P., & Can, E. (2021). Consequence modelling and analysis of methane explosions: A preliminary study on biogas stations. *Journal of Advanced Research in Natural and Applied Sciences*, 7(1), 132–144. <https://doi.org/10.28979/jarnas.890649>
  - Pohjola, J. K., Turunen, J. J., Lipping, T., & Ikonen, A. T. K. (2019). Probabilistic assessment of the impact of bottom sediment on doses to humans from a groundwater-mediated radionuclide release in a farm-lake scenario. [https://trepo.tuni.fi/bitstream/handle/10024/215144/Probabilistic\\_assessment\\_of\\_the\\_impact\\_2019.pdf](https://trepo.tuni.fi/bitstream/handle/10024/215144/Probabilistic_assessment_of_the_impact_2019.pdf)
  - Proyecto de Integración y Desarrollo de Mesoamérica. (s.f.). Red Mesoamericana de Gestión Integral de Riesgos (RMGIR). Recuperado el 10 de diciembre de 2025, de <https://rmgir.proyectomesoamerica.org/portal/apps/Cascade/index.html?appid=9d26834897164929846c3e716c0d9938>
  - Quillatre, P. (2017). *Relevance of the current modelling methods for the prediction of LNG vapour dispersion and development to be carried on*. Symposium Series No. 162, Hazards 27, Institution of Chemical Engineers (IChemE).
  - R. Bhushan Gopaluni, Aditya Tulsyan, Benoit Chachuat, Huang, B., Lee, J. M., Amjad, F., Seshu Kumar Damarla, Kim, J. W., & Lawrence, N. P. (2020). Modern Machine Learning Tools for Monitoring and Control of Industrial Processes: A Survey. *IFAC-PapersOnLine*, 53(2), 218–229. <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2020.12.126>
  - Salazar, M.A. (2022). *MATERIALES PELIGROSOS*. CENAPRED. [https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/788897/TEMA\\_1\\_2\\_MATERIALES\\_PELIGROSOS.pdf](https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/788897/TEMA_1_2_MATERIALES_PELIGROSOS.pdf)
  - Saturnino, L. (2024). *Benchmark Analysis of Accident Modelling Software Applied to Hydrogen Storage* [Tesis de Maestría, Politecnico di Torino]. <https://webthesis.biblio.polito.it/secure/32320/1/tesi.pdf>
  - Torrens, S. (2024). *Improved consequence and risk modelling with Phast and Safeti 9.0* [Diapositivas de presentación]. DNV.
  - UAEH. (s.f.). *Fugas y Derrames de Sustancias Químicas*. [https://www.uaeh.edu.mx/pcu/avisos/9/antes\\_durante\\_y\\_despues\\_de\\_fugas\\_y\\_derrames\\_de\\_sustancias\\_quimicas.pdf](https://www.uaeh.edu.mx/pcu/avisos/9/antes_durante_y_despues_de_fugas_y_derrames_de_sustancias_quimicas.pdf)
  - Ullah, K., Haq, Z. U., & Arshad, M. (2022). *Comparative analysis of chemical process simulation using open-source and commercial software*. IOP Conference series. ResearchGate. [https://www.researchgate.net/publication/366385594\\_Comparative\\_analysis\\_of\\_chemical\\_process\\_simulation\\_using\\_open-source\\_and\\_commercial\\_software](https://www.researchgate.net/publication/366385594_Comparative_analysis_of_chemical_process_simulation_using_open-source_and_commercial_software)
  - Universidad de los Andes. (2024). Tecnología | Universidad de Los Andes. Aspen Plus Suite. Recuperado de <https://tecnologia.uniandes.edu.co/aspen-plus-suite/>
  - University of Alberta. (2006). *Aspen HYSYS Operations Guide*. Department of Chemical & Materials Engineering. Recuperado de <https://sites.ualberta.ca/CMENG/che312/F06ChE416/HysysDocs/AspenHYSYSOperationsGuide.pdf>
  - Witlox, H. W. M., & Oke, A. (2008). Verification and validation of consequence models for accidental releases of hazardous chemicals to the atmosphere. En *Hazards XX: Process Safety and Environmental Protection* (Symposium Series No. 154). Institution of Chemical Engineers. <https://www.icheme.org/media/9766/xx-paper-72.pdf>