

MÁRCIO PIOVEZAN SALAZAR

Estudo sobre a modelagem da dispersão atmosférica de gases densos decorrente
de liberações acidentais em análise quantitativa de risco

São Paulo
2016

MÁRCIO PIOVEZAN SALAZAR

Estudo sobre a modelagem da dispersão atmosférica de gases densos decorrente de liberações acidentais em análise quantitativa de risco

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São
Paulo para obtenção do título de
Mestre em Ciências

São Paulo
2016

MÁRCIO PIOVEZAN SALAZAR

Estudo sobre a modelagem da dispersão atmosférica de gases densos decorrente de liberações acidentais em análise quantitativa de risco

Dissertação apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências

Área de concentração:
Engenharia Naval e Oceânica

Orientador: Prof. Associado
Marcelo Ramos Martins

São Paulo
2016

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, _____ de _____ de _____

Assinatura do autor: _____

Assinatura do orientador: _____

Catlogação-na-publicação

Salazar, Márcio Piovezan

Estudo sobre a modelagem da dispersão atmosférica de gases densos decorrente de liberações acidentais em análise quantitativa de risco / M. P. Salazar -- versão corr. -- São Paulo, 2016.

97 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Naval e Oceânica.

1.Análise quantitativa de risco 2.Análise de consequência de liberação acidental 3.Dispersão atmosférica de gás denso I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Naval e Oceânica II.t.

À Izabela, naturalmente.

AGRADECIMENTOS

A minha mãe, Maria Theodora, indubitavelmente.

Ao Professor Dr. Marcelo Ramos Martins pela oportunidade e apoio no desenvolvimento deste trabalho.

Aos Professores que participaram das bancas examinadoras no exame de qualificação e na defesa da dissertação, Prof. Dr. Enrique Andrés López Droguett, Prof. Dr. Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e Melo e Prof. Dr. Gilberto Francisco Martha de Souza, pelas relevantes contribuições.

À Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB) pela oportunidade concedida para a realização de meus estudos de Pós Graduação.

Ao Gerente da Divisão de Avaliação de Risco e Solo (IPR), Sidney Shinke, e à Gerente do Setor de Riscos Tecnológicos (IPRR), Vivienne Minniti, pela oportunidade e pelo apoio ao longo desta jornada.

Meu muito obrigado a todos do Setor de Riscos Tecnológicos da CETESB, Sandro Roberto Tomaz, José Carlos de M. Xavier, Leopoldine Solange M. Frioni, Déborah Oliveira de S. e Silva, Giuseppe Giulio Michelino, Moacir Ferreira da Silva, Marta Cano, Marcos Tadeu Seriacopi, Roseneide de Souza e Elisabeth Sousa.

Aos amigos do curso de mestrado e suas importantes contribuições para o desenvolvimento deste trabalho, Francisco Basílio, Vitor Medeiros e Marcos Shoiti.

Ao meu irmão Mestre médico veterinário Fernando Henrique P. Salazar, sua esposa Iliane Salazar, meus sobrinhos acadêmicos de medicina Bruno e Fernanda Salazar.

Agradeço aos companheiros da Akzo Nobel/FLEXSYS, com quem tive a oportunidade de trabalhar em uma cultura verdadeiramente de segurança e, principalmente, aos operadores com os quais muito aprendi como engenheiro. Tenho convicção que este trabalho começou naquele contexto...

RESUMO

A percepção crescente da sociedade em relação aos perigos inerentes às instalações industriais que manipulam grandes inventários de substâncias perigosas faz com que a ferramenta análise quantitativa de risco ganhe importância na complexa discussão sobre a viabilidade destes empreendimentos, no intuito de promover a ocupação adequada do solo na área urbana e prevenir a ocorrência do chamado acidente maior.

Contudo, para se chegar à expressão de risco de uma determinada instalação industrial deve-se aplicar um conjunto de técnicas e de modelos matemáticos, entre os quais estão os modelos de dispersão atmosférica, usados para se estimar a área afetada na vizinhança da mesma por liberações acidentais que levam à formação de nuvens de substâncias químicas na atmosfera.

Em decorrência da complexidade inerente ao próprio processo de dispersão atmosférica, especialmente no que tange aos denominados gases densos, existe uma diversidade de modelos que podem ser aplicados no escopo da análise de risco, o que leva a seus usuários, naturalmente, ao questionamento sobre a suscetibilidade dos resultados finais ao tipo de modelagem adotada.

Neste sentido, este trabalho estuda o processo de dispersão atmosférica de nuvens densas formadas em liberações acidentais, identificando as principais possibilidades de modelagem deste processo e, ao final, apresenta um estudo de caso demonstrando que diferentes modelagens desta dispersão, comumente empregadas em análise de risco de instalações industriais, podem produzir variações na estimativa do risco de uma mesma instalação e, portanto, influenciar as decisões baseadas em risco.

Palavras chaves. Análise quantitativa de risco. Risco tecnológico. Modelos de dispersão atmosférica. Dispersão de gás denso. Análise de consequências de liberações acidentais.

ABSTRACT

The concern of the society about the risks posed by activities that deal with hazardous substances has increased in an environment strongly industrialized and with high population density in view of the inherent potential hazards of them as well as the impact of recent accidental episodes, even though their benefits provided.

In this context the quantitative risk analysis is presented as an essential tool to assess the risk of these activities and compose a complex discussion about its feasibility.

Some of these accident scenarios may involve the formation of a hazardous product cloud and its subsequent air dispersion in the off-site region when an accidental release takes place and one should apply the so-called atmospheric dispersion models for estimating the consequences of the releases.

Due to the complexity involved in this atmospheric dispersion process, there is a wide variety of mathematical models that can be applied for estimating the off-site consequences of the accidental releases leading, naturally, to one wonder whether the final risk expression of a facility is susceptible to these differences.

Often in the world of industrial use of hazardous materials, toxic or flammable there is a possibility that these accidental releases produce clouds that are denser than air, a situation that demands even more attention in terms of risk aspects involved.

Then, this dissertation studies the process of atmospheric dispersion of heavier-than-air clouds produced after an accidental release, identifying the main ways of modelling the process and presents a case study comparing different dispersion models that demonstrates that the final expression of risk of a typical installation can be different when it is used different dispersion model in the process.

Key words. Quantitative risk analysis. Technological risk. Atmospheric dispersion models. Dense gas dispersion. Consequence of accidental releases.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Evolução do número de acidentes.....	1
Figura 2 - Acidente em Toulouse.	2
Figura 3 - Acidente em Bayamón.....	2
Figura 4 - Indústria química no Brasil.....	6
Figura 5 - Ocupação no entorno de instalação industrial.	7
Figura 6 - Dispersão atmosférica de nuvem densa.....	8
Figura 7 - Fluxograma de análise quantitativa de risco.	12
Figura 8 - Expressões de risco.....	14
Figura 9 - Possibilidades de liberações acidentais.....	16
Figura 10 - Camada limite atmosférica.....	19
Figura 11 - Perfil vertical de velocidade do vento.....	24
Figura 12 - Modelo de pluma gaussiana.	27
Figura 13 - Etapas na dispersão de nuvem densa.....	29
Figura 14 - Aspectos termodinâmicos na dispersão de nuvem densa.	30
Figura 15 - Correlações do <i>Workbook</i> de Britter & McQuaid.	32
Figura 16 - <i>Box models</i>	34
Figura 17 - Modelos de pluma.....	35
Figura 18 - Modelo UDM para liberação contínua.....	39
Figura 19 - Modelo de pluma de Colenbrander.	41
Figura 20 - Dispersão do modo pluma no SLAB.	44
Figura 21 - Fluxograma da modelagem da dispersão atmosférica em AQR.....	50
Figura 22 - Pluma típica de amônia.....	54
Figura 23 - Fração flasheada de amônia.....	55
Figura 24 - Ilustração de tanque de amônia.....	57

Figura 25 - Instrumentação em tanque de amônia pressurizado.	58
Figura 26 - Phast/UDM, Cenário 1, 3979 ppm de amônia.....	64
Figura 27 - Phast/UDM, Cenário 1, 12755 ppm de amônia.....	64
Figura 28 - Effects/SLAB, Cenário 1, 3979 ppm de amônia.....	65
Figura 29 - Effects/SLAB, Cenário 1, 12755 ppm de amônia.....	65
Figura 30 – ALOHA/DEGADIS, Cenário 1, 3979 ppm de amônia.....	66
Figura 31 – ALOHA/DEGADIS, Cenário 1, 12755 ppm de amônia.....	66
Figura 32 – ALOHA/MPG, Cenário 1, 3979 ppm de amônia.....	67
Figura 33 – ALOHA/MPG, Cenário 1, 12755 ppm de amônia.....	67
Figura 34 - Distâncias alcançadas no cenário 1.....	68
Figura 35 - Phast/UDM, Cenário 2, 3979 ppm de amônia.....	69
Figura 36 - Phast/UDM, Cenário 2, 12755 ppm de amônia.....	69
Figura 37 - Effects/SLAB, Cenário 2, 3979 ppm de amônia.....	70
Figura 38 - Effects/SLAB, Cenário 2, 12755 ppm de amônia.....	70
Figura 39 – ALOHA/DEGADIS, Cenário 2, 3979 ppm de amônia.....	71
Figura 40 – ALOHA/DEGADIS, Cenário 2, 12755 ppm de amônia.....	71
Figura 41 - ALOHA/MPG, Cenário 2, 3979 ppm de amônia.....	72
Figura 42 - Distâncias alcançadas no cenário 2.....	73
Figura 43 - Áreas geradas nas diferentes modelagens.....	75
Figura 44 - Evolução do risco individual nos softwares estudados.	76
Figura 45 - Testes de Maplin Sands e Thorney Islands na Inglaterra.	93
Figura 46 - Testes de Burro, Coyote e Falcon nos Estados Unidos.....	94
Figura 47 - Concentração com perfil de vento constante	96
Figura 48 - Concentração com perfil de vento exponencial	96
Figura 49 - Vazão no Effects para o cenário 2.	97

Figura 50 - Vazão no ALOHA para o cenário 2.....97

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Acidentes industriais.	3
Tabela 2 - Fatores de incerteza no cálculo do risco.	7
Tabela 3 - Acidentes em plantas químicas.....	9
Tabela 4 - Modelos usados em análise de consequência.....	15
Tabela 5 - Probabilidade de fatalidade em função do probit.	17
Tabela 6 - Classes de estabilidade atmosférica de Pasquill.	21
Tabela 7 - Valores típicos de critérios de estabilidade.	22
Tabela 8 - Expressões para perfil de velocidade vertical do vento.....	23
Tabela 9 - Classes de modelos de dispersão atmosférica de gás denso.....	31
Tabela 10 - Exemplos de modelos tipo integral.....	37
Tabela 11 - Modelos de água rasa bidimensionais.	46
Tabela 12 - Modelos tipo CFD.....	48
Tabela 13 - Modelos Lagrangeanos.....	49
Tabela 14 - Desempenho potencial dos modelos de dispersão.	50
Tabela 15 - Parâmetros de avaliação estatística.....	51
Tabela 16 - Propriedades da amônia.	53
Tabela 17 - Condições meteorológicas para simulações.	59
Tabela 18 - Constantes da equação de probit para a amônia.....	60
Tabela 19 - Sumário dos resultados para o cenário 1.....	68
Tabela 20 - Sumário dos resultados para o cenário 2.....	72

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	1
1.1 JUSTIFICATIVA.....	6
1.2 OBJETIVOS.....	10
1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	10
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	11
2.1 ANÁLISE QUANTITATIVA DE RISCO	11
2.2 DISPERSÃO ATMOSFÉRICA DE LIBERAÇÕES ACIDENTAIS.....	18
2.2.1 Meteorologia e topografia.....	18
2.2.2 Tipos de liberações acidentais e comportamento na dispersão.....	25
2.2.2.1 Dispersão de nuvens neutras ou leves.....	26
2.2.2.2 Dispersão de nuvens densas.....	28
2.2.3 Modelos de dispersão atmosférica de nuvens densas.....	30
2.2.3.1 Modelos empíricos ou fenomenológicos.....	31
2.2.3.2 Modelos intermediários ou integrais	32
2.2.3.3 Modelos bidimensionais baseados na aproximação de águas rasas .	45
2.2.3.4 Modelos de mecânica dos fluidos computacional (CFD)	47
2.2.3.5 Modelos Lagrangeanos	49
2.3 AVALIAÇÃO DE MODELOS DE DISPERSÃO.....	51
2.4 AMÔNIA.....	53
3 METODOLOGIA	57
3.1 CENÁRIOS COMPARATIVOS	57
3.2 <i>SOFTWARES</i>	60
4 RESULTADOS OBTIDOS	64
4.1 LIBERAÇÃO DE TODO INVENTÁRIO EM 10 MINUTOS	64

4.2 LIBERAÇÃO A PARTIR DE FURO DE 10 MILÍMETROS NO FUNDO DO RESERVATÓRIO	68
4.3 SÍNTESE E ANÁLISE DOS RESULTADOS DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA DE AMÔNIA.....	73
4.4 RISCO INDIVIDUAL PARA INSTALAÇÃO DE AMÔNIA.....	75
5 CONCLUSÕES.....	77
6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	80
7 GLOSSÁRIO.....	92
Anexo I - Testes de campo de dispersão atmosférica	93
Anexo II - Simulações adicionais.....	95

1 INTRODUÇÃO

A origem do problema: os acidentes maiores

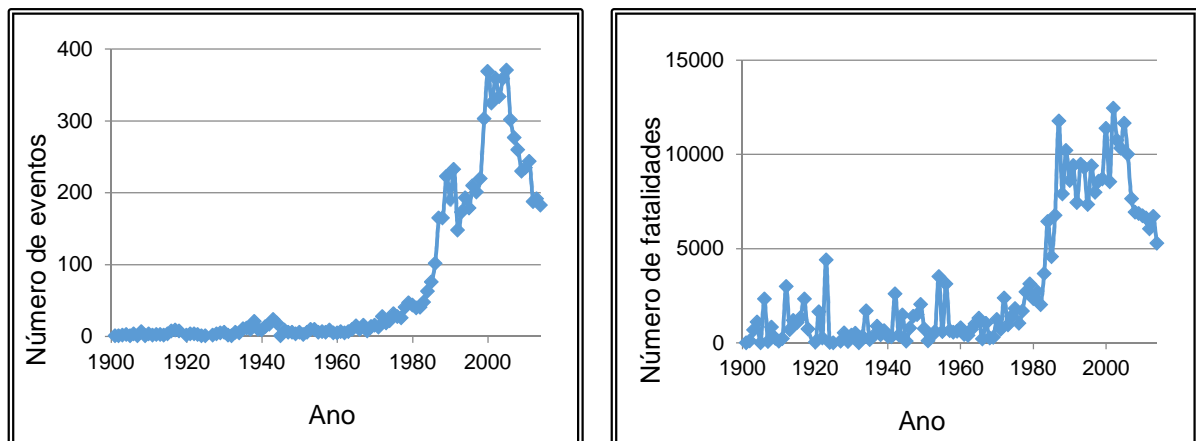
Não há atividade humana isenta de perigos (THE ROYAL SOCIETY, 1983).

Entretanto, especialmente a partir da Revolução Industrial no século XVIII, a humanidade passa a conviver não mais somente com os perigos inerentes à própria natureza em que vive, mas, sobretudo, com os perigos decorrentes da materialização de seu próprio conhecimento: os perigos de origem tecnológica.

O patamar de desenvolvimento e, naturalmente, de consumo da sociedade a partir do período da “explosão demográfica”, após a II Guerra Mundial, alavancou a expansão da atividade industrial, que, atrelada à conjuntura de competitividade intensa, foi feita à base de escalas de produção crescentes, condições de processos mais severas e com emprego de materiais mais complexos (MANNAN, 2012).

Contudo, na esteira deste processo de industrialização, não obstante os evidentes benefícios proporcionados, observa-se que o número de acidentes industriais e o número de fatalidades envolvidas nos mesmos aumentam consideravelmente a partir do final dos anos 60, conforme ilustra a Figura 1.

Figura 1 - Evolução do número de acidentes.



Fonte: Adaptado de Guha-Sapir; Below e Hoyois (2015).

O aumento na frequência de ocorrência e, sobretudo, das consequências em termo do número de fatalidades envolvidas nestes acidentes industriais levou ao reconhecimento de uma nova modalidade de acidente: os acidentes maiores (*major accident*), diferentes dos que aconteciam em épocas anteriores qualitativamente, por possibilitar consequências além dos limites das instalações, e quantitativamente, pelo potencial de fatalidades que podem produzir (FREITAS et al., 1995).

O acidente ocorrido em Toulouse, França, em 2001, onde a explosão na planta de fertilizantes atingiu a magnitude de 3,4 graus na escala Richter, produzindo uma cratera de 65 m x 54 m x 8 m, 31 pessoas mortas, 3000 feridas e prejuízo de 3 bilhões de dólares, ilustrado na Figura 2 (TAVEAU, 2010), e o acidente ocorrido em Bayamón, Porto Rico, em 2009, que atingiu 2,9 graus na escala Richter e danos em um raio de 2 km da instalação, ilustrado na Figura 3 (CSB, 2015), ilustram os aspectos típicos e as características de um acidente maior.

Figura 2 - Acidente em Toulouse.



Fonte: Taveau (2010).

Figura 3 - Acidente em Bayamón.



Fonte: CSB (2015).

A Tabela 1 ilustra outros exemplos destes acidentes maiores, que também podem ser encontrados, por exemplo, em MIHAILIDOU; ANTONIADIS, ASSAEL

(2012), ou em banco de dados de acidentes, como o Sistema de Registros de Grandes Acidentes MARS ou e-MARS (NIVOLIANITOU; KONSTANDINIDOU; CHRISTOU, 2006) ou no Banco Internacional de Desastres EM-DAT, entre outros.

Tabela 1 - Acidentes industriais.

Título do acidente	Ano	Tipo de Indústria	Local	Referência
Fogo e explosão	2009	Planta de cumeno	Taina, Taiwan	(CHEN et al., 2010)
Explosão e incêndio	2009	Trem de GLP	Viareggio, Itália	(BRAMBILLA; MANCA, 2010)
Explosão e incêndio	2005	Depósito de combustíveis	Buncefield, UK	(JOHNSON, 2010)
Explosão	2005	Refinaria de petróleo	Texas, USA	(CSB, 2007)

A percepção do problema: a análise de risco

A regulamentação governamental sobre a questão de acidentes industriais historicamente avançou motivada por ocorrências de grande repercussão: o primeiro decreto regulamentando a questão de grandes acidentes remete já ao ano de 1810 na França, produzido em resposta à explosão na fábrica de pólvora de Grenelle, em 1794, com cerca de 1000 fatalidades (VIERENDEELS; RENIERS; ALE, 2011).

Analogamente, dois grandes acidentes, o de Flixborough (Inglaterra) em 1974, com 28 vítimas fatais e danos materiais em um raio de 1,6 km do empreendimento (VENART, 2007) e o ocorrido em Seveso (Itália) em 1976, com a evacuação de mais de 600 pessoas e contaminação em uma área de 10 milhas quadradas (WETTIG; PORTER; KIRCHSTEIGER, 1999) fizeram com que diversas regulamentações de segurança, já existentes de forma pulverizada na Europa, convergissem para o estabelecimento de uma legislação única para prevenção e controle de grandes acidentes industriais: a Diretiva Seveso I, em 1982 (CEC, 1982).

Não obstante, o acidente ocorrido em Bhopal (Índia) em 1984, especialmente, com mais de 3000 mortes e 100000 feridos (MANNAN et al., 2005) demonstrou, de forma dramática, que as consequências desse novo tipo de acidente industrial poderiam, ainda, ser severamente agravadas em decorrência da presença de população vulnerável no entorno das instalações (COZZANI et al., 2006).

Essa constatação levou à revisão da legislação europeia sobre grandes acidentes que culminou na publicação da Diretiva de Seveso II, em 1996, (CEC, 1997), que abordou, em seu artigo 12, a questão do uso e ocupação do solo nas vizinhanças de instalações industriais, tornando compulsório o estabelecimento de distâncias de separação entre essas instalações e as ocupações vulneráveis no seu entorno com base na magnitude do risco gerado, com intuito de prevenir e limitar as consequências de grandes acidentes (CHRISTOU; GYENES; STRUCKL, 2011).

Em resposta à demanda por conhecimento e estimação do risco em instalações industriais, somada à diversificação dos tipos de perigos envolvidos no próprio desenvolvimento industrial, foram desenvolvidas a partir de então várias metodologias para prevenção e proteção contra acidentes, seja por entidades governamentais, seja pelos próprios operadores industriais (TIXIER et al., 2002).

Entre as metodologias ou ferramentas desenvolvidas para prevenção e proteção contra os perigos industriais, a que se apresenta para se estimar o risco de instalações industriais de forma a permitir, sobretudo, a comparação contra critérios de tolerabilidade governamentais é a análise quantitativa de risco (AQR), também chamada de análise probabilística de risco (PRA) ou análise probabilística de segurança (APS) (CHRISTOU; AMENDOLA; SMEDER, 1999).

A análise quantitativa de risco nos termos abordados nesta dissertação tem suas raízes na indústria nuclear e aeroespacial e foca, caracteristicamente, nos perigos agudos, ou seja, nos perigos decorrentes de eventos raros, porém potencialmente catastróficos, que podem surgir nas instalações de base tecnológica (CCPS, 2000), sendo realizada, segundo Pasman (2011), por quatro razões básicas:

- 1) Para melhorar a segurança de uma planta industrial;
- 2) Para o licenciamento de plantas industriais;
- 3) Para organizar o uso e ocupação do solo no entorno de instalações;
- 4) Para elaborar / aperfeiçoar o plano de emergência da instalação.

Modarres; Kaminskiy e Krivtsov (1999) sintetizam, de forma categórica, o processo estruturado de estimativa de risco estabelecido em uma AQR com base nas respostas a três perguntas que caracterizam o risco de uma instalação:

- 1) O que pode dar errado nesta instalação?
- 2) Qual a probabilidade deste erro ocorrer?
- 3) Quais são as consequências deste erro?

Suscetibilidade na análise de risco: modelos de dispersão atmosférica

Na estimativa do risco de instalações industriais, algumas das hipóteses acidentais plausíveis levam o analista de risco a se defrontar com eventos que envolvem a formação e posterior dispersão de uma nuvem de produto na atmosfera, momento no qual devem ser empregados os modelos de dispersão atmosférica.

A questão fundamental a ser respondida por um modelo de dispersão atmosférica em análise de risco é: dado que houve a liberação acidental de “X” toneladas de um produto, até qual distância, desde o ponto de sua liberação, a nuvem formada por este produto na atmosfera se deslocará até que esteja suficientemente diluída e não haja mais perigo de explosão, incêndio ou toxicidade?

No início da década de 80, potencializado pela quantidade de acidentes industriais que estavam acontecendo, houve um grande desenvolvimento no estudo do fenômeno da dispersão atmosférica de produtos perigosos, principalmente no que tange aos gases mais densos do que o ar, com a realização de vários testes em campo (Anexo I) e avanços na modelagem física (com estudos em túnel de vento ou em canal de água), que permitiram o desenvolvimento de diversos modelos matemáticos para a representação deste fenômeno (LUKETA-HANLIN, 2006).

No campo da dispersão atmosférica de nuvens densas é reconhecida a existência de cerca de uma centena de modelos, todos reivindicando boa aderência aos dados experimentais de laboratório e de campo (BRITTER, 1989).

Em decorrência desta variedade de modelos existe, naturalmente, uma preocupação, seja por parte dos usuários ou dos próprios desenvolvedores, a respeito da adequação dos mesmos aos seus propósitos (BOOT, 2013).

Esta preocupação manifesta-se nos vários estudos comparativos já feitos entre estes modelos e, existe, fundamentalmente, em virtude das importantes decisões baseadas nas estimativas de risco decorrentes dos resultados gerados nos mesmos: uma unidade industrial pode ser instalada em uma determinada região? Qual o melhor ponto na instalação para se armazenar um produto perigoso? Pode ser aumentada a capacidade de armazenamento de um produto perigoso?

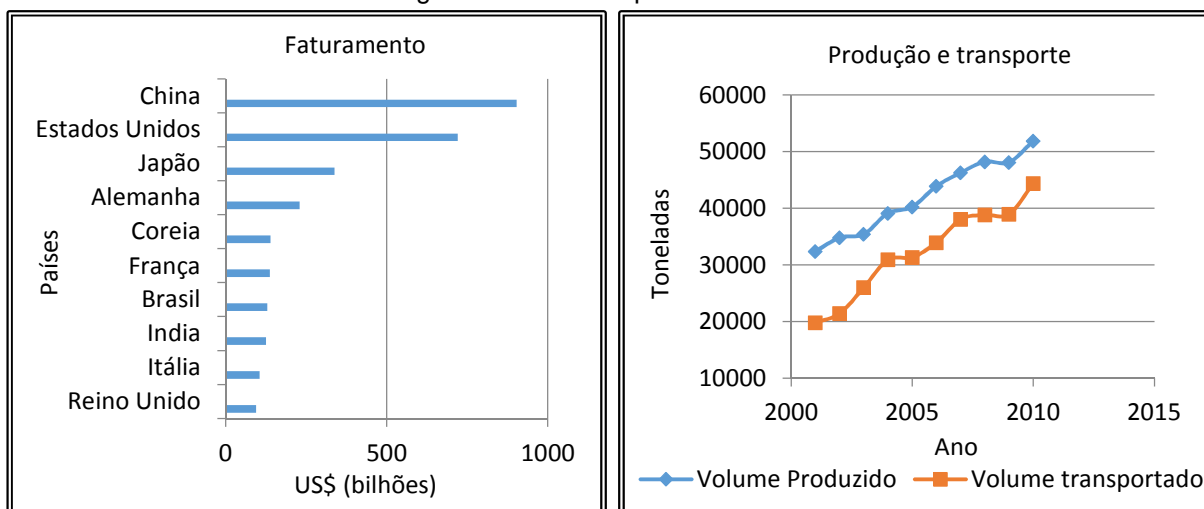
Além disso, por último, acrescenta-se que não há menção legal quanto à adoção de um modelo de dispersão atmosférica específico para a finalidade de análise de risco no escopo da avaliação de impacto ambiental (CETESB, 2011), ao contrário da posição adotada, por exemplo, na Holanda (UIJT de HAAG et al., 2013), deixando a escolha livre e irrestrita para o analista de risco.

1.1 JUSTIFICATIVA

Existem diversas atividades industriais que operam com grandes inventários de substâncias potencialmente perigosas, como, por exemplo, a indústria alimentícia, a indústria petroquímica e a própria indústria química, tomada como representante desta atividade, que, em função da complexidade envolvida em seus processos, são chamadas por Perrow (1999) instalações de tecnologia de alto risco.

Assim, em decorrência de seu processo de industrialização, atualmente existe no Brasil uma indústria química consolidada, cuja importância pode ser ilustrada pela dimensão do faturamento do setor quando comparado ao de outros países, pela taxa de crescimento que vem experimentando, conforme ilustra a Figura 4, e pela quantidade de empreendimentos instalados: somente no estado de São Paulo existem 558 plantas industriais químicas (ABIQUIM, 2013).

Figura 4 - Indústria química no Brasil.

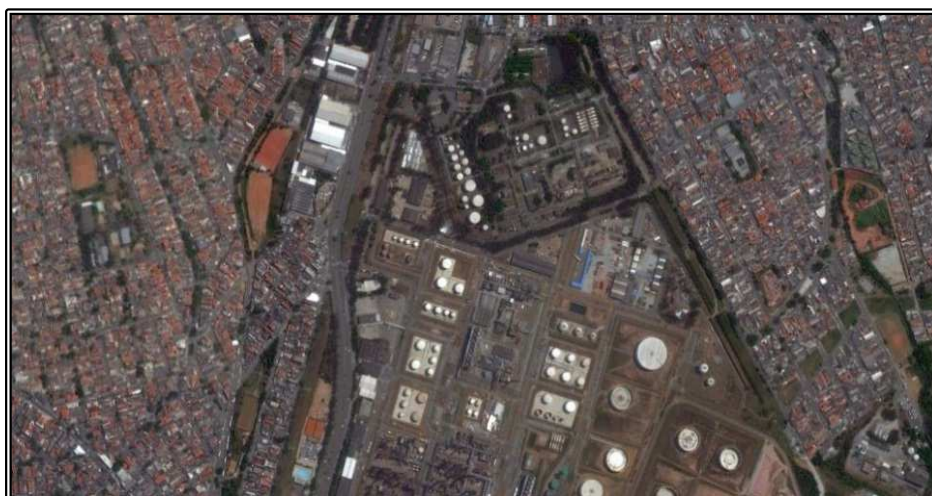


Fonte: CNI (2012).

Em paralelo ao processo de industrialização, o Brasil experimentou a partir de 1940 um grande aumento na taxa de urbanização (IBGE, 2010), não acompanhada, entretanto, de uma gestão pública adequada.

Desta forma, originam-se as mazelas sociais relacionadas à estrutura urbana, como a poluição, problemas de mobilidade urbana e as ocupações irregulares, como, por exemplo, a ocupação no entorno de instalações que armazenam substâncias perigosas, ilustrada na Figura 5 (MELLO, 2011), geralmente áreas bem providas de infraestrutura.

Figura 5 - Ocupação no entorno de instalação industrial.



Fonte: Google Earth®.

Nesta conjuntura, ou seja, de presença de indústrias de alta complexidade que operam com grandes inventários de substâncias perigosas em áreas urbanas, a ferramenta consolidada mundialmente e adotada tanto por autoridades governamentais quanto pelos próprios operadores industriais para avaliar o risco destes empreendimentos é a análise quantitativa de risco (BONVICINI et al., 2012).

Porém, para se chegar à expressão de risco de sistemas complexos como estes, deve-se usar um conjunto de técnicas e uma variedade de modelos matemáticos que atribuem variações na estimativa final (FABBRI; CONTINI, 2009).

Pasman et al. (2009) apresenta uma avaliação qualitativa sobre a importância dos fatores contribuintes para esta variabilidade com base nos resultados do projeto europeu de *benchmark* em análise de risco descrito por Lauridsen et al. (2002), conforme a Tabela 2 a seguir:

Tabela 2 - Fatores de incerteza no cálculo do risco.

Fator de incerteza	Importância
Diferenças na análise qualitativa	**
Avaliação de frequência de falhas para dutos	***
Avaliação de frequência de falhas para tanques pressurizados	****
Escolha do modelo de dispersão: gás leve, neutro ou denso	****
Diferença entre códigos de cálculo de dispersão	***

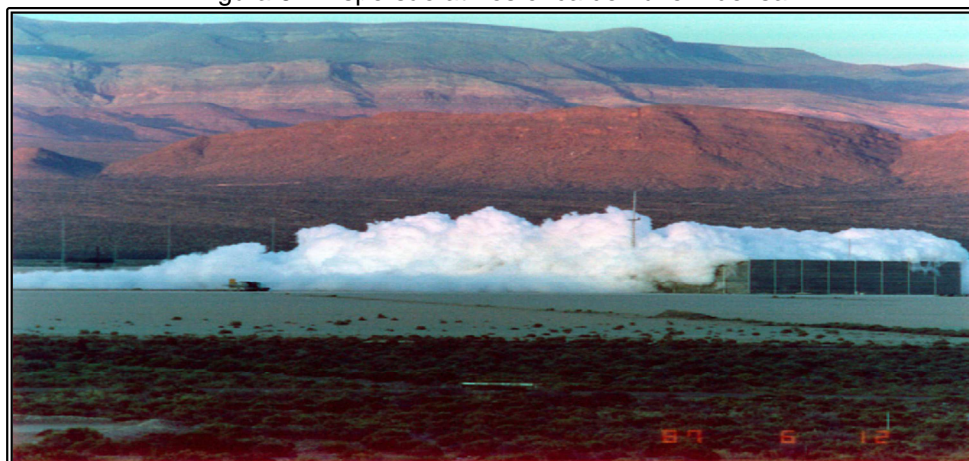
Fonte: Adaptado de Pasman et al. (2009).

Assim, a incerteza na estimativa de risco associada aos modelos de dispersão atmosférica fica clara, e agrava-se, ainda, quando se leva em consideração a quantidade destes modelos disponíveis e a inexistência de previsão legal quanto ao uso de um determinado tipo de modelo neste escopo.

Muitas substâncias de interesse quanto aos aspectos de risco e objetos de análise de risco, como o cloro, o gás liquefeito de petróleo (GLP) e a amônia, se enquadram em uma categoria de produtos caracterizados por poder formar nuvens mais densas do que o ar em uma liberação accidental.

Esta categoria de substâncias apresenta um processo peculiar de dispersão atmosférica que as fazem tender a se concentrar nas proximidades da superfície, conforme ilustrado na Figura 6, potencializando a exposição dos receptores aos seus efeitos e exigindo, assim, maior atenção do analista de risco; em decorrência deste aspecto, esta pesquisa é focada especificamente nesta classe de substância.

Figura 6 - Dispersão atmosférica de nuvem densa.



Fonte: Koopman e Ermak (2007).

Entretanto, dentro das várias possibilidades de substâncias que podem formar nuvens densas, este trabalho será direcionado ao estudo da dispersão de nuvens que produzam efeitos tóxicos nas vizinhanças da liberação.

Esta escolha é oriunda do alto potencial de fatalidade associado ao cenário accidental de uma liberação tóxica, conforme a Tabela 3, em relação aos demais tipos de cenários accidentais possíveis em plantas químicas: incêndios são os acidentes com maior probabilidade de ocorrência, seguidos de explosões e liberações de substâncias tóxicas; entretanto, em termos do potencial de fatalidades, a ordem se inverte, sendo liderada pela liberação accidental de substâncias tóxicas.

Tabela 3 - Acidentes em plantas químicas.

Tipo de acidente	Probabilidade de ocorrência	Potencial de fatalidade	Potencial de perda econômica
Incêndio	Alta	Baixo	Intermediário
Explosão	Intermediária	Intermediário	Alto
Liberação tóxica	Baixa	Alto	Baixo

Fonte: (CROWL; LOUVAR, 2011).

A substância selecionada para representar a classe de produtos tóxicos e que se comporte como nuvem densa em uma liberação acidental foi a amônia; a escolha de uma instalação que manipule amônia como objeto deste trabalho, fundamentalmente, teve duas razões como pressuposto:

- A grande periculosidade da amônia: substância extremamente tóxica, corrosiva, inflamável e explosiva em certas condições e que, embora não seja caracterizada por se comportar como gás denso, o faz em decorrência de seu processo peculiar de liberação e dispersão; o acidente ocorrido em Dakar envolvendo a falha em um tanque de 22 toneladas de amônia que causou um grande número de fatalidade (129 óbitos e 1100 feridos) ilustra este aspecto (BOUET; DUPLANTIER; SALVI, 2005);
- A grande utilização deste produto químico na indústria de uma forma geral, por exemplo, como fluido de trabalho em sistemas de refrigeração, especialmente em indústrias alimentícias empregando mão de obra intensiva, ou na indústria de fertilizantes, o que permite que o estudo atinja uma amplitude maior, pois está incluída em um percentual significativo dos relatórios de análise quantitativa de risco.

Concluindo, em um ambiente altamente industrializado e em expansão, em que é possível a presença de ocupação sensível nas vizinhanças de instalações que manipulem ou armazenem grandes quantidades de produtos perigosos, é justificável o emprego de ferramentas como a análise quantitativa de risco e compulsória a busca por um maior conhecimento em sua aplicação a fim de se proporcionar maior acurácia em seus resultados, por meio de um maior entendimento em uma de suas mais relevantes etapas, a análise de consequências, que por sua vez remete ao uso de modelos de dispersão atmosférica, objeto desta dissertação.

1.2 OBJETIVOS

A pesquisa apresentada nesta dissertação de mestrado tem como objetivo principal a avaliação da suscetibilidade da expressão de risco individual fruto da aplicação de diferentes modelagens de dispersão atmosférica de gases densos decorrentes de liberações acidentais disponíveis em *softwares* comumente usados em análise de risco.

Em um segundo plano, para este objetivo ser alcançado, será estudado o fenômeno da dispersão atmosférica de um gás denso, identificando o que o diferencia da dispersão de um gás leve ou neutro, e serão identificados modelos de dispersão atmosférica de gases densos aplicáveis no escopo da análise quantitativa do risco.

1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

Esta dissertação apresenta a seguinte estrutura:

O capítulo 1 contextualiza o tema abordado na pesquisa, apresenta os objetivos pretendidos e a forma em que o texto está desenvolvido.

O capítulo 2 apresenta os principais conceitos e autores em análise quantitativa de risco e dispersão atmosférica de gás denso, as principais publicações sobre comparações entre modelos já feitas e uma descrição da substância amônia.

O capítulo 3 apresenta a metodologia adotada para se comparar diferentes modelagens de dispersão atmosférica usadas em análise de risco.

O capítulo 4 apresenta os resultados obtidos nos *softwares* de risco em termos das áreas e distâncias alcançadas pelas nuvens tóxicas e os cálculos das expressões de risco para cada um destes *softwares*.

O capítulo 5 apresenta as conclusões sobre os resultados obtidos, bem como sugestões para eventuais trabalhos futuros.

No capítulo 6 são apresentadas as referências usadas na elaboração deste estudo e que podem ser consultadas para aprofundamento no assunto.

O capítulo 7 traz um glossário de termos aplicados em análise de risco.

Por último, nos anexos são apresentados alguns testes de campo de dispersão atmosférica e gráficos adicionais de simulações.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo são apresentados os conceitos gerais que auxiliam o entendimento do processo de dispersão atmosférica no contexto da análise quantitativa de risco por meio da citação dos principais autores sobre o assunto.

Na seção 2.1 é feita uma apresentação dos principais conceitos referentes à análise quantitativa de risco.

Na seção 2.2 são apresentados os principais conceitos de meteorologia e topografia relevantes em dispersão atmosférica, as principais formas de liberação de produtos em plantas de processo abordadas em análise de risco e são descritas as formas de modelagem desta dispersão atmosférica.

Na seção 2.3 é feita uma apresentação dos principais estudos comparativos entre modelos de dispersão e sobre a avaliação dos mesmos.

Na seção 2.4 é feita uma apresentação das principais características da dispersão atmosférica da amônia, produto escolhido para ser estudado no exercício de aplicação de modelos.

2.1 ANÁLISE QUANTITATIVA DE RISCO

O conceito de risco propriamente dito remonta ao ano de 1662, quando matemáticos do mosteiro de Porto Real, em Paris, formalmente definem que o risco deveria ser proporcional não meramente à gravidade do dano causado, mas, também, à probabilidade de ocorrência de seu evento iniciador; fundamentalmente esta definição de risco não se alterou nos últimos 350 anos (CCPS, 2009).

Não obstante em 1967 já ter sido proposto um critério de risco baseado na dimensão de incidente x frequência de ocorrência para reatores nucleares, a curva de Farmer (FARMER, 1967), o estudo WASH-1400, publicado pela Comissão de Regulamentação Nuclear dos EUA em 1975 (RASMUSSEN, 1975), é considerado o início formal da análise quantitativa de risco (PASMAN; RENIERS, 2014).

O estudo nas instalações petroquímicas da Ilha de Canvey, no Reino Unido, em 1978, e o estudo holandês feito na região de Rijnmond, o estudo de COVO por Cremer e Warner, em 1982, são as primeiras aplicações da ferramenta de análise quantitativa de risco em instalações não nucleares (PASMAN; RENIERS, 2014).

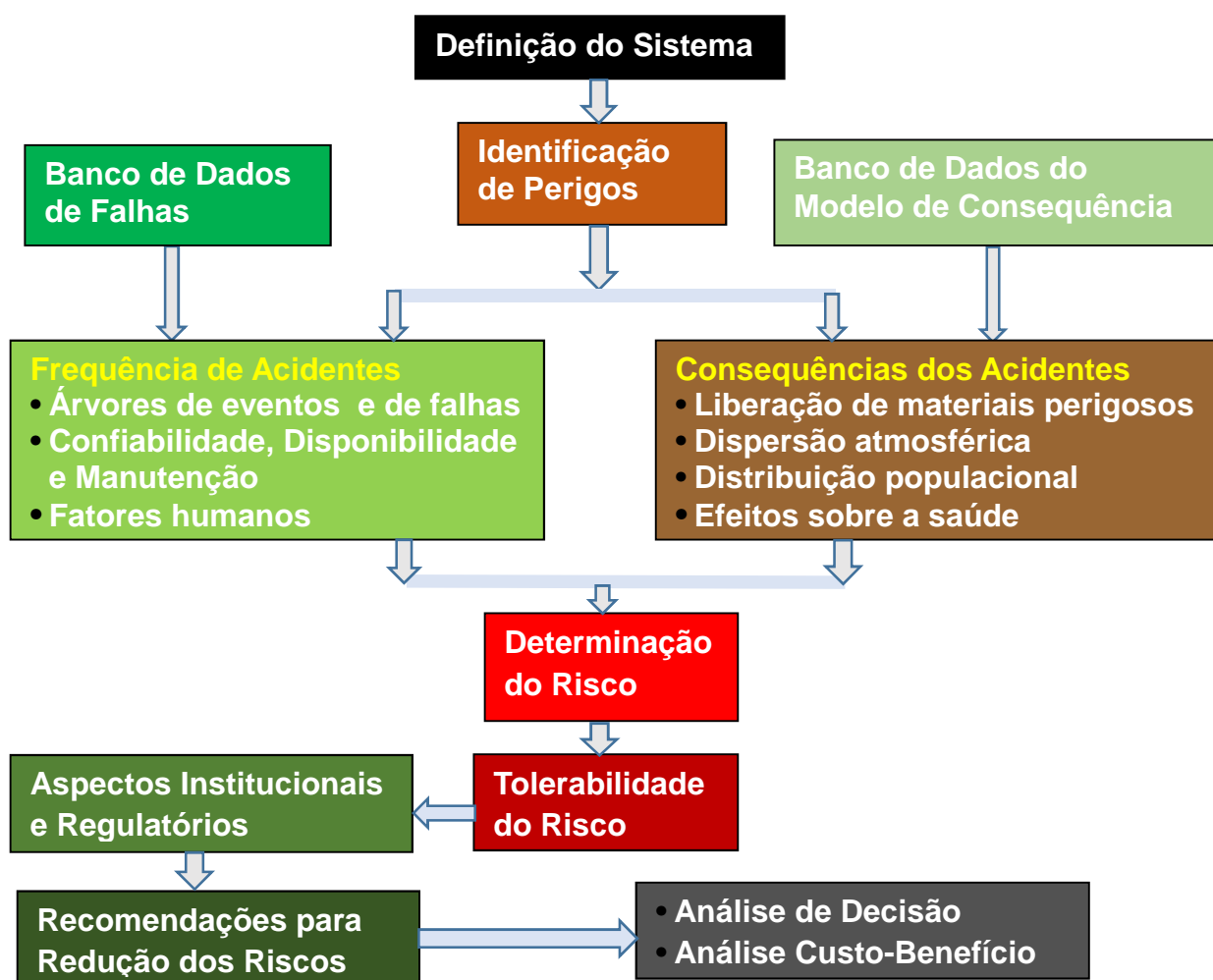
Nesta esteira, Casal (2008) define a análise quantitativa de risco (AQR) como uma metodologia para estimar o risco de instalações industriais que manipulam substâncias perigosas decorrente da perda de contenção das mesmas

em um processo, sendo este risco expresso matematicamente em função do evento acidental de perda de contenção (e), da consequência desta perda de processo refletida no número de fatalidades (N) e da frequência de ocorrência deste evento (f) (PREM et al., 2010) conforme a eq. (1):

$$\text{Risco} = F(e, N, f) \quad (1)$$

Conforme Frutuoso (2014), a análise quantitativa de risco de uma instalação industrial que manipule substâncias perigosas consiste nas etapas apresentadas no fluxograma da Figura 7:

Figura 7 - Fluxograma de análise quantitativa de risco.



Fonte: Adaptado de Frutuoso (2014).

A primeira etapa na AQR é a definição do sistema a ser estudado, sobre o qual se aplica uma das técnicas de identificação de perigos e seleção de cenários acidentais plausíveis de ocorrer e que responda a questão inicial sobre o quê pode dar errado no mesmo (MODARRES; KAMINSKIY; KRIVTSOV, 1999).

Esta identificação de perigos é feita com base nas propriedades físicas e químicas dos produtos manipulados na instalação e nas condições em que estes são armazenados por meio de técnicas estruturadas como a *Hazard and Operability Studies* (HAZOP), *Failure Mode and Effects Analysis* (FMEA), *Failure Mode, Effects and Criticality Analysis* (FEMECA) entre outras (KHAN; ABBASI, 1998).

Em uma segunda etapa é feita a análise das consequências destas hipóteses acidentais através da aplicação de modelos matemáticos que quantificam os impactos das mesmas nas vizinhanças em que ocorrem em termos de radiação térmica (incêndios), sobrepressão (explosões) e concentração de produto tóxico.

A terceira etapa estima as frequências de ocorrência dos cenários acidentais com técnicas como a análise por árvores de falhas (AAF), usada para calcular a frequência de ocorrência das hipóteses acidentais, e a análise por árvores de eventos (AAE), usada para estimar as frequências dos desdobramentos das hipóteses acidentais em função das interferências na evolução do acidente, as frequências dos cenários acidentais (VILCHEZ; ESPEJO; CASAL, 2011).

Finalmente, é feita a estimativa do risco da instalação em estudo, que pode ser expresso por meio da expressão de risco individual (RI) ou da expressão de risco social (RS), sobre as quais são aplicados os critérios de tolerabilidade estabelecidos pelos órgãos reguladores (CETESB, 2011).

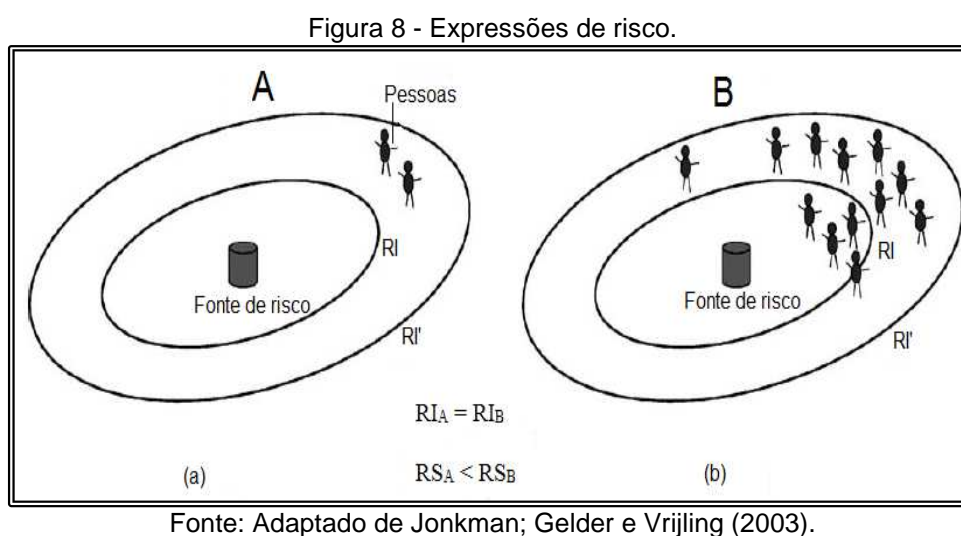
O RI é a probabilidade de morte de um indivíduo em uma localização fixa, permanente, sem proteção, em decorrência de um acidente industrial; o risco individual representa somente o nível de risco de uma determinada localização e não leva em consideração se o indivíduo está, de fato, nesta posição, sendo representado de acordo com a eq. (2):

$$RI = P_f \cdot P_{df} \quad (2)$$

Onde, P_f é a probabilidade de ocorrência do acidente e P_{df} é a probabilidade de morte individual decorrente do acidente (ZHOU; LIU, 2012).

O risco social é a expressão do risco gerado em um empreendimento para um agrupamento de pessoas presentes nas vizinhanças da instalação, considerando um período de tempo definido; sua apresentação se dá por meio da chamada curva FN, onde F representa a frequência acumulada de ocorrência dos cenários com número de fatalidades N ou mais, conforme CCPS (2000).

A diferença entre estas duas expressões de risco está ilustrada na Figura 8, que compara o risco individual (RI) e o risco social (RS) em duas instalações, A e B, sujeitas à mesma fonte de risco, porém, com população de interesse distinta.



A metodologia deve contemplar, ainda, uma etapa onde se investiga medidas para redução de risco, seja pela redução da frequência de ocorrência dos cenários acidentais ou seja pela redução de suas consequências, ou de ambos os aspectos, e se faz uma nova estimativa do risco com estes dados atualizados.

Contudo, para se chegar às expressões de risco mencionadas acima é necessário o emprego de uma série de modelos matemáticos.

Hardy (2012) define um “modelo” como uma representação física, matemática ou lógica de um sistema, de um fenômeno ou de um processo e, nesta esteira, ainda, definindo “simulação” como um método de execução de um modelo sendo, basicamente, considerada como uma imitação das características do sistema, fenômeno ou processo, usando um modelo computacional.

O autor, ainda, cita que a simulação computacional através de modelos fornece uma forma de analisar o comportamento de um sistema quando existem

várias possibilidades de configurações ou dados de entrada para serem avaliados ou quando a realização de testes é difícil ou mesmo impossível.

A Tabela 4 ilustra alguns modelos usados em análise quantitativa de risco:

Tabela 4 - Modelos usados em análise de consequência.

Tipo de Modelo	Objetivo
Modelo de termo fonte	Estimar a quantidade liberada ou taxa de liberação; é a base para a análise de evaporação e de dispersão.
Modelo de evaporação	Estimar a quantidade evaporada ou taxa de evaporação; é a entrada para os modelos de dispersão.
Modelo de dispersão atmosférica	Estimar as concentrações do poluente em função da distância e / ou do tempo.
Modelo de impacto de explosões de nuvem de vapor	Estimar a pressão máxima e o impacto em função da distância ou duração; é a base para análise de vulnerabilidade.
Modelo de radiação de calor	Estimar a carga térmica em função da distância; é a base para análise de vulnerabilidade.
Modelo de vulnerabilidade de pessoas e meio ambiente	Estimar os impactos de toxicidade, radiação térmica e ondas de pressão sobre pessoas.

Fonte: Adaptado de Kakko (1991).

Desta forma, considerando a Tabela 4, os modelos e suas simulações computacionais desempenham um importante papel no processo de identificação e avaliação de sistemas potencialmente perigosos, bem como na redução do risco associados aos mesmos com base na análise quantitativa de risco, entre os quais estão os modelos de dispersão atmosférica, assunto principal deste trabalho.

A dispersão atmosférica de uma nuvem formada na liberação acidental de um fluido, desde a perda de sua contenção até a diluição abaixo de níveis considerados perigosos, pode ser estudada dividindo o processo em dois estágios: a formação do termo fonte e a dispersão atmosférica em si, embora na prática seja difícil definir a fronteira exata entre estes dois estágios (WEBBER et al., 2009).

O primeiro estágio ocorre imediatamente após a liberação acidental, quando o comportamento do fluido é dominado, ainda, pelas condições em que o mesmo estava armazenado (pressão e temperatura do tanque de armazenamento) e pelas condições particulares em que ocorre a liberação (geometria e localização de um furo); na sequência do processo, conforme a influência da fonte se reduz, a

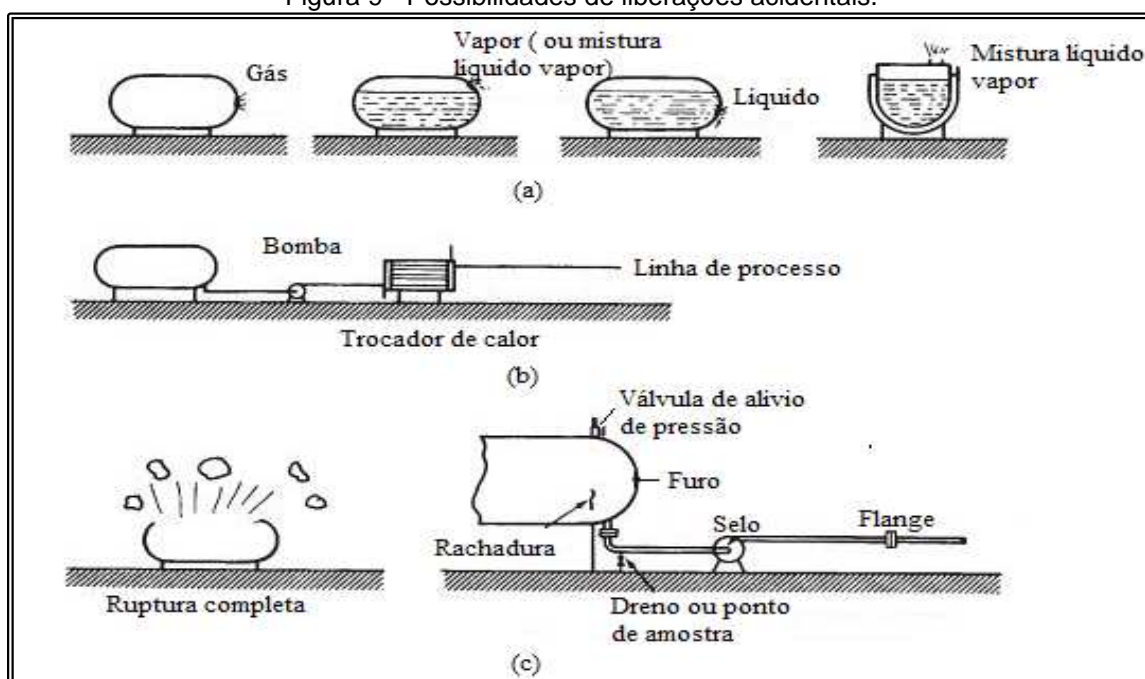
atmosfera e suas condições passam a ser cada vez mais importantes, controlando, assim, o comportamento do fluido (WEBBER et al., 2009).

A especificação do termo fonte é tão importante quanto o próprio modelo de dispersão em si, sendo fundamental a definição de um modelo apropriado para a estimativa adequada das entradas nos modelos de dispersão atmosférica em termos da taxa de vazamento ou quantidade total de material perdida na liberação (ou tempo total de vazamento) e do estado físico do produto (IVINGS et al., 2013).

Vários modelos de fonte foram desenvolvidos com base nas equações de conservação de massa, de energia e de momento, no tamanho e na forma de furos em linhas e vasos de processo e no estado físico da liberação, sendo os mais comumente empregados na análise de risco os modelos de fluxo de líquido ou vapor por furos em linhas ou na parede de tanques, fluxo de líquido em dutos, vaporização instantânea de líquidos e evaporação de poça de líquido (AL-SHANINI; AHMAD e KHAN, 2014; WEBBER et al., 2009; BRITTER et al., 2011).

A Figura 9 ilustra algumas possibilidades de liberações acidentais contempladas em análise de risco.

Figura 9 - Possibilidades de liberações acidentais.



Fonte: Adaptado de LEES (1996). a) Possibilidades de liberação acidental em função da condição inicial da substância; b) em função do local em que ocorre e c) quanto ao porte da liberação.

No estudo de avaliação de consequências das hipóteses acidentais, finalizada a modelagem do efeito do acidente em si (radiação térmica, sobrepressão ou dispersão de substância tóxica na atmosfera), deve ser feita a conversão destes resultados para o impacto dos mesmos sobre o ser humano com a aplicação dos chamados modelos de vulnerabilidade (HANSLER; GOOIJER; WOLTING, 2013).

Para o propósito da análise quantitativa de risco discutido nesta dissertação, o método para análise de vulnerabilidade usado é a abordagem baseada em funções de probit, conforme Bliss (1934) apud Finney (1971): modelos usados para avaliar a resposta do ser humano, por exemplo, aos efeitos de radiação térmica, ou concentração de uma substância tóxica com modelos de probabilidade de dano.

Conforme Bubbico; Mazzarotta e Verdone (2014) a função probit para o efeito de fatalidade decorrente da exposição à nuvem tóxica é dada pela eq. (3):

$$Pr = a + b \ln(C^n t) \quad (3)$$

Onde Pr é o probit associado à probabilidade de fatalidade P, conforme Tabela 5; a, b e n são constantes características da toxicidade da substância; t é o tempo de exposição em minutos à concentração C em partes por milhão (ppm) de substância.

Tabela 5 - Probabilidade de fatalidade em função do probit.

P	0	0,01	0,02	0,03	0,04	0,05	0,06	0,07	0,08	0,09
0	-	2,67	2,95	3,12	3,25	3,36	3,45	3,52	3,59	3,66
0,1	3,72	3,77	3,82	3,87	3,92	3,96	4,01	4,05	4,08	4,12
0,2	4,16	4,19	4,23	4,26	4,29	4,33	4,36	4,39	4,42	4,45
0,3	4,48	4,50	4,53	4,56	4,59	4,61	4,64	4,67	4,69	4,72
0,4	4,75	4,77	4,80	4,82	4,85	4,87	4,90	4,92	4,95	4,97
0,5	5,00	5,03	5,05	5,08	5,10	5,13	5,15	5,18	5,20	5,23
0,6	5,25	5,28	5,31	5,33	5,36	5,39	5,41	5,44	5,47	5,50
0,7	5,52	5,55	5,58	5,61	5,64	5,67	5,71	5,74	5,77	5,81
0,8	5,84	5,88	5,92	5,95	5,99	6,04	6,08	6,13	6,18	6,23
0,9	6,28	6,34	6,41	6,48	6,55	6,64	6,75	6,88	7,05	7,33

Fonte: CPR 18E (2005).

Al-Shanini; Ahmad e Khan (2014) descrevem uma série de modelos de probit que podem ser aplicados no contexto da análise quantitativa de risco.

2.2 DISPERSÃO ATMOSFÉRICA DE LIBERAÇÕES ACIDENTAIS

O termo dispersão é usado na modelagem de acidentes para descrever a evolução de uma nuvem de produto tóxico ou inflamável na atmosfera; esta dispersão acontece por meio da difusão e pelo transporte pelo vento, chamado advecção: a nuvem se move na direção do vento e, simultaneamente, também, perpendicular a esta direção em função da turbulência atmosférica (CASAL, 2008).

O objetivo dos modelos de dispersão atmosférica na AQR é estimar a área afetada e a concentração do contaminante esperada no entorno da região em que ocorre a liberação acidental (CCPS, 1999).

A concentração do produto liberado na atmosfera é função do volume de ar disponível para diluir este material, sendo este volume de ar definido pela altura da camada limite atmosférica e pela velocidade de advecção na região do lançamento (LELOSSY et al., 2014); assim, todos os modelos de dispersão atmosférica usam informações sobre as condições meteorológicas locais como dados de entrada para estimar as áreas afetadas nas liberações acidentais (MARX; CORNWELL, 2009).

Desta forma, a seguir é apresentada uma descrição dos principais conceitos de micrometeorologia na modelagem da dispersão atmosférica e as formas de modelar esta dispersão associada às possibilidades de liberações acidentais.

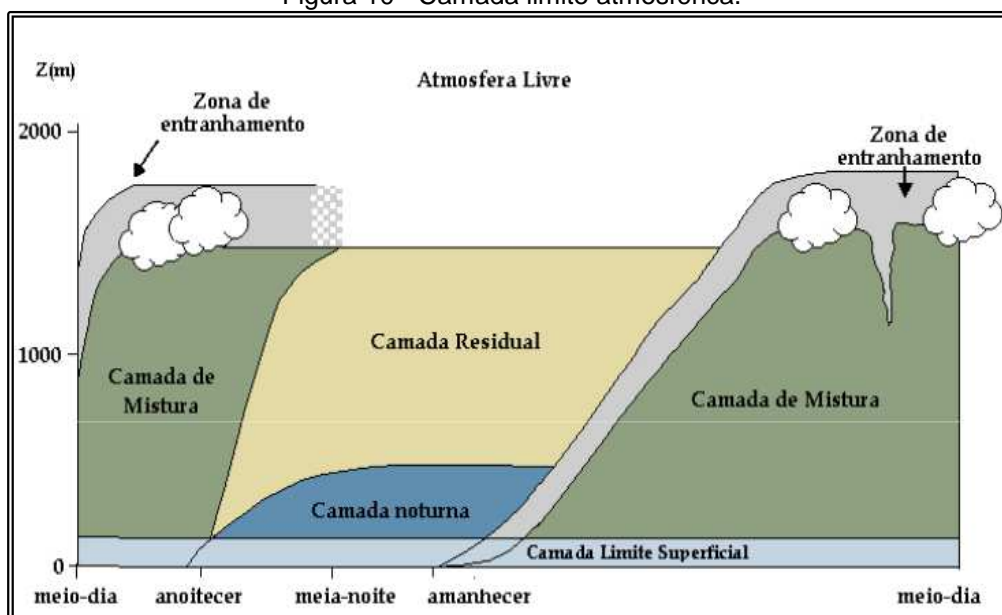
2.2.1 Meteorologia e topografia

A atmosfera terrestre possui uma estrutura vertical extremamente variada no que se refere às suas características, sendo, em função disso, dividida em camadas.

A camada mais baixa de ar desta atmosfera, dentro da chamada troposfera, que está em contato direto com a superfície terrestre, com extensão de 1 a 2 quilômetros, é denominada camada limite planetária (CLP) ou camada limite atmosférica (CLA); é a camada onde vivemos, são construídos os edifícios, desenvolvemos a agricultura e, também, onde ocorrem as liberações acidentais e o processo posterior de dispersão atmosférica relevante para análise de risco.

Esta camada apresenta uma natureza única se comparada com as demais camadas atmosféricas em decorrência de seu contato com a superfície terrestre: o ciclo diário de variação de temperatura, vento e estabilidade, conforme Figura 10.

Figura 10 - Camada limite atmosférica.



Fonte: Adaptado de STULL (2000).

Com tempo bom, a CLA diurna, chamada camada limite convectiva (CLC) ou camada de mistura (CM), é estaticamente instável, devido à convecção térmica associada ao aquecimento da superfície, um fluxo térmico positivo; à noite, a CLA se divide em duas camadas: uma camada limite noturna, estaticamente estável (CLE), com fluxo térmico negativo, e a camada residual (CR), estaticamente neutra, acima da CLE, com as características da CM, porém com fluxo térmico próximo de zero.

Dentro da CLA existe uma camada em contato direto com o solo, comum à CLC diurna e à CLE noturna, a camada limite superficial (CLS), caracterizada por fluxos turbulentos uniformes com a altura, e que constitui os 20 a 200 metros inferiores da CLA (10%); a camada acima da CLA, a atmosfera livre (AL), não é mais influenciada pela turbulência; entre a CLA e a AL encontra-se a zona de entranhamento de ar, ou camada de inversão, fortemente estável.

A turbulência

A turbulência na atmosfera é definida como o movimento aleatório de pacotes de ar (da ordem de 2 milímetros a 2 quilômetros), chamados vórtices, sendo a responsável pelo transporte de momento, calor e massa entre a superfície e a atmosfera; uma medida da intensidade desta turbulência atmosférica é dada pela energia cinética turbulenta específica (ECT), definida na eq. (4):

$$\frac{\partial(\text{ECT})}{\partial t} = A + PM + PT + Tr - \varepsilon \quad (4)$$

Onde A é a advecção de ECT pelo vento médio; PM a produção mecânica de ECT pelo cisalhamento do vento na superfície (velocidades maiores de vento próximo do solo causam maior cisalhamento e geram mais turbulência); PT é a produção ou destruição térmica de turbulência por empuxo na atmosfera (quando as termas estão subindo a partir de uma superfície quente, geram ECT; por outro lado, com superfícies frias e CLA estável estaticamente, o empuxo se opõe ao movimento vertical, consumindo ECT); Tr é o transporte por movimentos turbulentos ou de pressão (que não gera e nem destrói ECT, apenas redistribui esta energia) e ε é a taxa de dissipação molecular de turbulência (STULL, 2000).

Assim, a turbulência tende a se auto eliminar, de acordo com o Princípio de Le Chatelier, exceto se for produzida continuamente (STULL, 2000).

A estabilidade atmosférica

Estabilidade é um termo aplicado qualitativamente à propriedade da atmosfera que governa o movimento de aceleração vertical de um pacote de ar, sendo usada para definir o estado de turbulência ou descrever a capacidade dispersante desta atmosfera.

Existem diferentes métodos para determinar a estabilidade na atmosfera: o desvio padrão da direção do vento horizontal, o gradiente vertical de temperatura, o número de Richardson, o comprimento de Monin-Obukhov e o método de Pasquill-Gifford (MOHAN; SIDDIQUI, 1998).

O sistema de classificação de estabilidade atmosférica mais aplicado na modelagem de dispersão atmosférica, segundo CPR14E (2005), é o sistema desenvolvido por Pasquill e Gifford com base em dados meteorológicos rotineiros como velocidade do vento, radiação solar e condições de nebulosidade à noite.

Assim, Pasquill e Gifford apresentaram uma forma prática para classificar a estabilidade atmosférica associando as letras “A” à “F” aos diferentes graus de turbulência, conforme ilustrado na Tabela 6 (PASQUILL; SMITH, 1983).

Segundo Stull (2000) as regiões associadas ao período noturno com velocidade de vento menor do que 2 m/s foram associadas, posteriormente, à classe de estabilidade G.

Tabela 6 - Classes de estabilidade atmosférica de Pasquill.

Velocidade do vento (m/s)	Dia: Insolação			Noite: Nebulosidade	
	Forte	Moderada	Leve	>4/8	<3/8
< 2	A	A - B	B	-	-
2-3	A - B	B	C	E	F
3-5	B	B - C	C	D	E
5-6	C	C - D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

Fonte: Pasquill e Smith (1983).

Notas:

1. A (condição de convecção livre, extremamente instável), B (moderadamente instável), C (ligeiramente instável), D (convecção forçada, neutra), E (ligeiramente estável) e F (moderadamente estável);
2. Insolação forte ($>700 \text{ W/m}^2$), moderada ($350 - 700 \text{ W/m}^2$) e fraca ($< 350 \text{ W/m}^2$);
3. Noite se refere ao período entre 1 hora antes do por do sol e 1 hora após a alvorada;
4. A nebulosidade é definida como a fração do céu acima do horizonte visível coberto por nuvens.

Experimentalmente, observa-se que em condições atmosféricas estáveis (E, F) e baixas velocidades de vento a nuvem se propaga à maiores distâncias antes de se diluir, em decorrência da supressão da turbulência pela estratificação estável que reduz o processo de misturação (LUKETA-HANLIN; KOOPMAN; ERMAK, 2007).

Segundo CPR14E (2005), resultados melhores na modelagem de dispersão atmosférica podem ser obtidos se forem adotados esquemas quantitativos que usam parâmetros físicos da camada limite atmosférica (comprimento de rugosidade (z_0), fluxo de calor (q''), velocidade de fricção (u^*) e o comprimento de Monin-Obukhov (L)), ao invés de esquemas qualitativos como o de Pasquill-Guifford.

O critério do número adimensional de Richardson (Ri) para a estabilidade dinâmica da atmosfera relaciona a ação estabilizadora da força de empuxo à ação instabilizadora da força associada ao cisalhamento do vento, conforme a eq. (5):

$$Ri = \frac{g}{T} \frac{(\partial\theta/\partial z)}{(\partial u/\partial z)^2} \quad (5)$$

Onde g é a aceleração da gravidade, T a temperatura absoluta, θ a temperatura potencial, z a altura e u a velocidade do vento; o fluxo atmosférico é dinamicamente instável e, portanto, turbulento, quando $Ri < 0,25$, indicando que o cisalhamento no vento é relativamente forte em relação à estabilidade estática (STULL, 2000).

Outro critério de estabilidade usado em modelos de dispersão tem origem na teoria de similaridade desenvolvida por Monin-Obukhov, em 1954, para descrever a turbulência na camada limite atmosférica (JACOBSON, 2005).

O comprimento de Monin-Obukhov, conforme a eq. (6), fornece uma medida da estabilidade na camada de mistura associada à altura acima do solo na qual a turbulência gerada mecanicamente é igual à turbulência dissipada pelo fluxo de calor (LUKETA-HANLIN; KOOPMAN, ERMAK, 2007; LARSEN et al., 2015).

$$L \equiv \frac{-\rho_a c_p T_a u^{*3}}{kgq''} \quad (6)$$

Onde ρ_a , c_p e T_a são a densidade, o calor específico e a temperatura próximo da superfície, respectivamente, q'' é o fluxo de calor para a atmosfera (J/m^2s) e k é a constante de von Karman (LUKETA-HANLIN; KOOPMAN, ERMAK, 2007).

A relação entre os critérios de estabilidade de Pasquill, o número de Richardson (Ri), o comprimento de Monin-Obukhov (L) e a altura da camada de mistura para fluxos em $z_0 = 1$ centímetro pode ser vista na Tabela 7.

Tabela 7 - Valores típicos de critérios de estabilidade.

Classe de estabilidade de Pasquill	Número de Richardson (R_i)	Comprimento de Monin-Obukhov (L)	Altura da camada de mistura, m
A	-1,0 a -0,7	-2 a -3	1300
B	-0,5 a -0,4	-4 a -5	900
C	-0,17 a -0,13	-12 a -15	850
D	0	Infinito	800
E	0,03 a 0,05	35 a 75	400
F	0,05 a 0,11	8 a 35	100

Fonte: Adaptado de Gifford (1976) e Tickle e Carlisle (2008).

O vento

O vento e, em particular, sua natureza turbulenta, é um agente de grande importância na dispersão de qualquer material lançado na atmosfera; os dados referentes ao vento normalmente são tomados a 10 metros de altura, conforme CPR14E (2005), porém, como as liberações acidentais acontecem nas proximidades do solo, esses dados devem ser corrigidos para esta condição.

Segundo STULL (2000), na CLS estaticamente neutra, onde existe o predomínio da turbulência mecânica sobre a turbulência induzida termicamente, a velocidade vertical do vento aumenta de forma logarítmica com a altura, segundo a lei logarítmica de perfil de velocidade de vento ou lei da parede (*wall law*).

Em condições estaticamente estáveis a velocidade do vento é descrita pelo chamado perfil log-linear de vento; o parâmetro “ α ” assume diferentes valores de acordo com a classe de estabilidade atmosférica (BUSINGER et al., 1971); em condições instáveis, o perfil de velocidade também é descrito desta forma, porém, com uma expressão mais complexa para “ α ”.

Uma simplificação das equações de perfil de velocidade de vento aplicável às classes de estabilidade estável e instável, bastante usada em modelos de dispersão, é o chamado perfil de velocidade vertical da Lei das Potências para atualizar o valor da velocidade de vento a partir de um valor de referência, Z_{ref} (PATRA, 2006); o expoente “ p ” nesta Lei das Potências depende da classe de estabilidade atmosférica e do comprimento de rugosidade (IRWIN, 1979).

Estes diferentes equacionamentos estão apresentados na Tabela 8.

Tabela 8 - Expressões para perfil de velocidade vertical do vento.	
Perfil de velocidade vertical do vento	Expressão
Perfil logarítmico ou Lei da parede	$u(z) = \frac{u^*}{k} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right)$
Perfil log-linear	$u(z) = \frac{u^*}{k} \left[\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \alpha \left(\frac{z}{L}\right) \right]$
Lei das potências	$u(z) = u(z_{ref}) \left(\frac{z}{z_{ref}}\right)^p$

Um aspecto importante, ainda, em relação à velocidade de vento se refere à aplicabilidade de modelos de dispersão atmosférica em condições de baixa velocidade de vento, abordada especialmente por Lines; Deaves e Atkins (1997) e relevante, principalmente, no que tange à dispersão de nuvens densas.

A Topografia

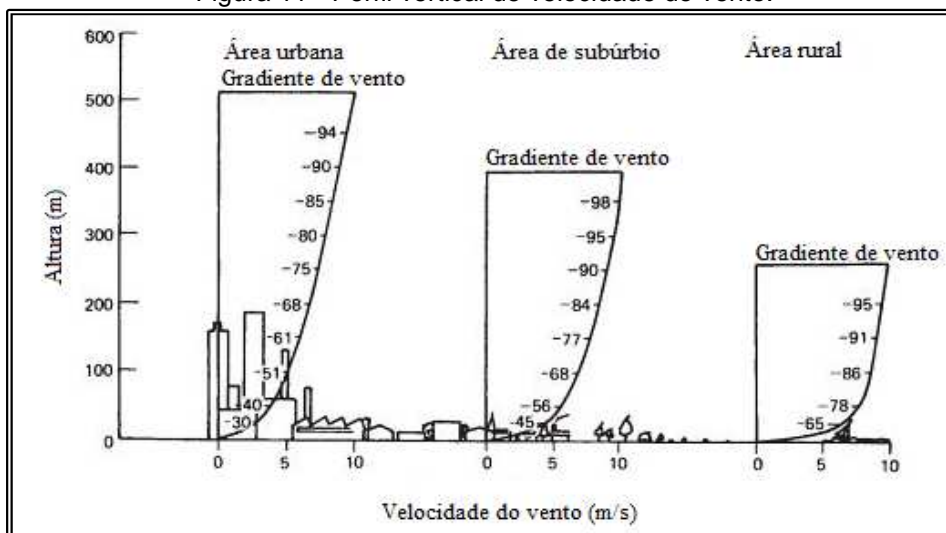
Nos problemas de modelagem de dispersão atmosférica, outro aspecto de grande influência é a topografia em que ocorre o processo de dispersão.

É provável que a liberação accidental de um produto químico ocorra em um local que possua, por exemplo, edificações em seu entorno, o que pode modificar o modelo de fluxo de vento na camada limite atmosférica, de forma a alterar as taxas de diluição da pluma e a sua própria trajetória (MERONEY, 2012).

Conforme o vento passa sobre a superfície do solo, o atrito existente neste contato retarda o fluxo do vento nas proximidades da superfície; em grandes alturas, esta influência do solo não existe mais e a velocidade é determinada apenas pelos gradientes de pressão e pela força de Coriolis, que resultam do movimento rotacional da terra (SEINFELD; PANDIS, 2006).

Desta forma, a rugosidade aerodinâmica da superfície, descrita pelo comprimento de rugosidade, indica a altura em que a velocidade horizontal média do vento tende a zero, conforme ilustrado na Figura 11, como resultado das interferências de objetos que podem estar presentes no trajeto da nuvem, como prédios, árvores e encostas, no perfil de velocidade do vento (RIVM, 2009).

Figura 11 - Perfil vertical de velocidade do vento.



Fonte: Adaptado de Lees (1996).

Nesse sentido, o comprimento de rugosidade é uma medida (artificial) que indica como é a composição em termos de obstáculos na vizinhança em que ocorre a liberação acidental e sua influência na velocidade do vento (RIVM, 2009); valores típicos destes comprimentos de rugosidade podem ser encontrados em STULL (2000) ou RIVM (2009) para várias superfícies, variando desde 0,0002 metros no mar, a valores maiores do que 2 metros em centros de cidades grandes.

Assim, a previsão dos modelos de dispersão considerando o terreno plano, sem obstruções, forneceria uma solução conservadora; ou seja, se a liberação acidental encontrar em seu caminho um prédio, ou uma parede, é esperado que a turbulência maior devido a estes obstáculos tenda a diluir a concentração de produto perigoso no interior da pluma (HANNA; DRIVAS; CHANG, 1996).

Não obstante, ainda, o trabalho de Puttock (1987) estabeleça que a influência desta rugosidade do terreno não seja tão grande nos estágios iniciais da dispersão de uma nuvem densa.

2.2.2 Tipos de liberações acidentais e comportamento na dispersão

Conforme Melhem (2006), a forma como ocorre a liberação acidental na unidade de processo influencia substancialmente a análise do processo de dispersão atmosférica; assim, cada uma das diferentes possibilidades de liberação acidental ilustrada na Figura 9, introduz sua característica peculiar no processo subsequente de dispersão: um jato, por exemplo, associado a um alto momento, se dilui mais rapidamente na atmosfera do que uma pluma nas proximidades da fonte.

Nesta esteira, segundo Seinfeld e Pandis (2006), nos problemas de dispersão atmosférica existem dois tipos idealizados de liberação acidental: as liberações instantâneas, aproximação convencional para uma liberação rápida de quantidade de material, originando o que se chama de *puff*, e as liberações contínuas, que podem ser vistas como a emissão de um número infinito de *puffs* com intervalo de tempo infinitesimal entre eles; Montoya; Planas e Casal (2009) apresentam algoritmos que permitem distinguir estas duas formas de liberação.

Estas liberações contínuas são divididas, ainda, em duas categorias com base no momento associado ao fluido: liberações contínuas caracterizadas por apresentarem baixo momento, chamadas de plumas, e liberações contínuas com domínio de momento, os chamados de jatos.

Além disso, a nuvem formada em uma liberação acidental pode se comportar de três maneiras durante o processo de dispersão na atmosfera com base na diferença entre a sua densidade e a densidade do ar no ambiente: a nuvem pode ser mais leve do que o ar pode apresentar densidade próxima à densidade do ar ambiente ou pode ser mais pesada do que o ar, a chamada nuvem densa.

Se a nuvem deve, ou não, ser considerada densa irá depender do seu excesso de densidade em relação ao ar e das condições ambientais em que ocorre a liberação acidental, condições estas consideradas no número adimensional de Richardson (R_{io}), que representa a razão entre a energia potencial inicial dentro da nuvem, devido ao seu excesso de densidade em relação ao ar, e sua energia cinética, devida a turbulência atmosférica (IVINGS et al., 2013); para uma pluma ao nível do solo, por exemplo, o número de Richardson é representado pela eq. (7):

$$R_{io} = \frac{g(\rho_{po} - \rho_a)}{\rho_a} \frac{V_{co}}{D_o u^{*3}} \quad (7)$$

Onde ρ_{po} e ρ_a são as densidades da pluma e do ar (kg/m^3), V_{co} a vazão inicial da pluma (m^3/s) e D_o a largura inicial da pluma (m) (HANNA; DRIVAS; CHANG, 1996).

Desta forma, para valores de número de Richardson menores do que 50 os efeitos de gás denso não são relevantes para a análise do processo de dispersão e não se deve aplicar um modelo de gás denso (HANNA; DRIVAS; CHANG, 1996).

Ainda, segundo Melhem (2006), o denominador na eq.(7), sendo função da classe de estabilidade atmosférica e da velocidade do vento, possui valor muito menor em condições de baixas velocidades de vento e em condições atmosféricas estáveis, indicando que o efeito de gás denso é mais importante quando a dispersão atmosférica acontece nestas condições, o que ratifica as observações experimentais de Burro com gás natural liquefeito (Anexo I), onde somente na série 8 realizada com velocidade de vento de 1,8 m/s a 2 metros de altura e classe F de estabilidade atmosférica, foi demonstrado, de fato, o comportamento de gás denso.

2.2.2.1 Dispersão de nuvens neutras ou leves

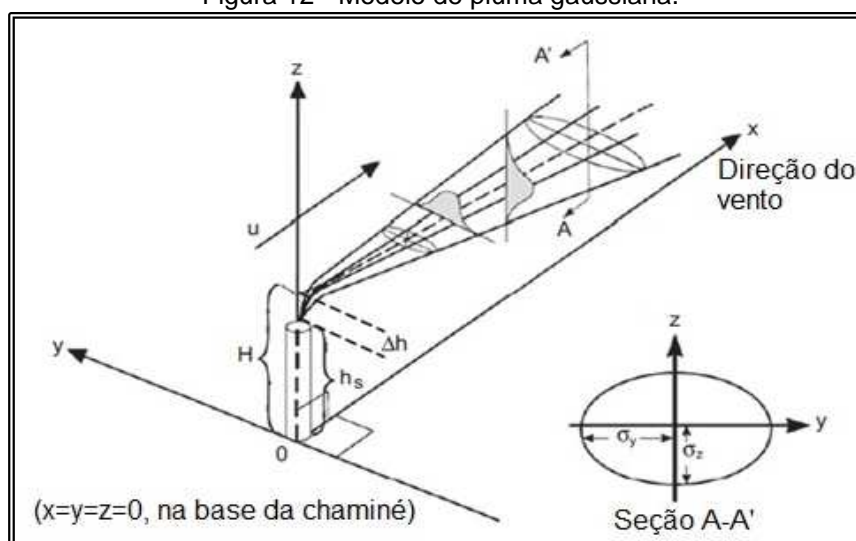
O processo de dispersão atmosférica de uma nuvem considerada leve ou neutra em relação à atmosfera, em que a condição desta atmosfera não é alterada em função da presença do poluente, é chamado processo de dispersão passiva sendo, portanto, um processo governado unicamente pela turbulência atmosférica, ou seja, pela estabilidade nesta atmosfera (CPR 14E, 2005).

Os modelos de *puff* ou pluma gaussiana (MPG) derivados dos trabalhos de Sutton (1932), Pasquill (1961 e 1974) e Guifford (1961 e 1968) são amplamente empregados para modelar a dispersão atmosférica neste contexto (CPR14E, 2005).

Segundo Montoya; Planas e Casal (2009) o modelo gaussiano é baseado nas seguintes hipóteses simplificadoras: vazão mássica constante durante todo o vazamento; massa emitida constante na atmosfera (ou seja, não ocorre reação química, por exemplo); inexistência de efeito gravitacional sobre o material emitido; condições meteorológicas constantes no tempo e rugosidade da superfície uniforme.

O MPG deriva da equação da difusão atmosférica e de observações feitas em trabalhos experimentais e estabelece que a concentração do poluente segue uma distribuição gaussiana, conforme ilustra a Figura 12, com o parâmetro da distribuição, o desvio padrão (σ), sendo função da turbulência atmosférica e da distância a partir da fonte emissora ou da duração da liberação (DEMAEL; CARISSIMO, 2008); o modelo pode ser aplicado em distâncias curtas, desde o ponto de liberação até distâncias correspondente a três horas de viagem; a partir deste ponto, modelos de longas distâncias devem ser aplicados (CPR14E, 2005).

Figura 12 - Modelo de pluma gaussiana.



Fonte: Adaptado de Díaz e Zafrilla (2012).

Segundo CPR14E (2005), as principais diferenças entre os modelos de pluma gaussiana estão na definição do valor da velocidade de advecção e na escolha dos parâmetros de dispersão; a eq. (8) ilustra o modelo de pluma para liberação contínua; Seinfeld e Pandis (2006), Casal (2008) e Crowl e Louvar (2011) apresentam as equações do modelo para diversas outras condições de liberação.

$$C_0(x,y,z) = \frac{q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right] \quad (8)$$

Nesta equação, $C_0(x,y,z)$ é a concentração do poluente na posição (x,y,z) , “q” a vazão mássica de emissão de poluente, σ_y e σ_z , parâmetros de dispersão lateral e vertical e H a altura efetiva da fonte.

2.2.2.2 Dispersão de nuvens densas

Segundo Britter (1998), as razões para uma nuvem ser mais pesada do que o ar em uma liberação acidental são: o próprio peso molecular do material (o cloro ou o propano, por exemplo), a temperatura (o gás natural liquefeito, por exemplo, armazenado a -160°C), a presença de aerossol na nuvem em processos de vaporização instantânea (como a amônia armazenada sob pressão) e a ocorrência de reações químicas (oligomerizações do ácido fluorídrico, por exemplo).

As experiências de Van Ulden em 1974 com gases densos demonstraram que a dispersão destes materiais era significativamente diferente da dispersão conhecida até então, a dos gases neutros ou mais leves do que o ar: a dispersão lateral era quatro vezes maior que a de um gás neutro, enquanto que a dispersão vertical era quatro vezes menor, ilustrando o processo de dispersão atmosférica gravitacional (COX, 1980; VAN ULDEN, 1987; HANNA; DRIVAS; CHANG, 1996).

A diferença entre estes dois processos de dispersão é que a taxa de entrada de ar pela superfície superior da nuvem densa pode ser significativamente menor pelo gradiente de densidade e que a nuvem se move horizontalmente, inclusive na direção oposta à direção do vento (CLEAVER; JOHNSON; HO, 2007).

Desta forma, embora os modelos matemáticos para dispersão atmosférica de nuvens passivas tenham sido desenvolvidos com base nos princípios

fundamentais da dinâmica de fluidos e possuem reconhecido desempenho, eles não foram bem-sucedidos na modelagem de gases densos (KHAN; ABBASI, 2000).

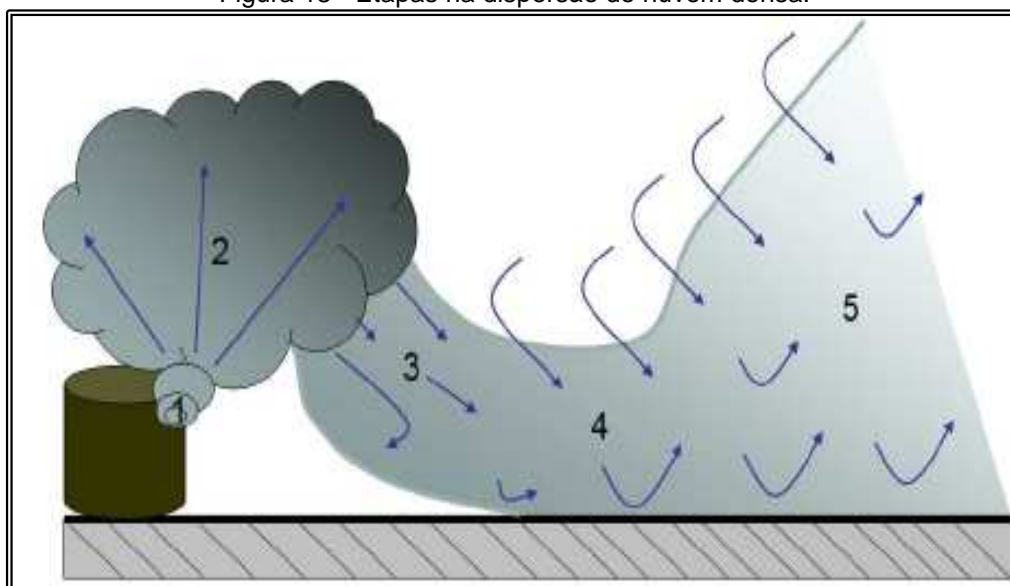
Segundo Britter e McQuaid (1988) o processo de dispersão atmosférica de uma nuvem densa pode ser dividido em cinco fases principais, conforme está ilustrado na Figura 13, com base em observações de acidentes e de experimentos, que podem, entretanto, variar em função do processo de liberação acidental e do próprio mecanismo do processo de dispersão.

A primeira fase, 1 na Figura 13, se refere à liberação do gás propriamente dita, ou seja, seu termo fonte; na segunda fase, número 2, ocorre a expansão volumétrica contra a pressão atmosférica.

A próxima etapa no processo de dispersão é uma fase dominada pelas forças de empuxo (*buoyancy step*), chamada dispersão gravitacional (o *puff* inicial, que possui aspecto de um cilindro, geometria idealizada para o caso de liberação instantânea em decorrência da ruptura catastrófica de um vaso de armazenamento contendo um gás liquefeito sob pressão, é forçado para baixo pela força da gravidade e espalha-se radialmente enquanto, simultaneamente, sua altura vai se reduzindo), identificado como 3 na Figura 13.

A seguir a nuvem passa por uma fase de transição para atingir a fase de dispersão passiva, fase 5, onde possui densidade e velocidade similar a do ar no ambiente nas vizinhanças da liberação e são válidos os MPG.

Figura 13 - Etapas na dispersão de nuvem densa.



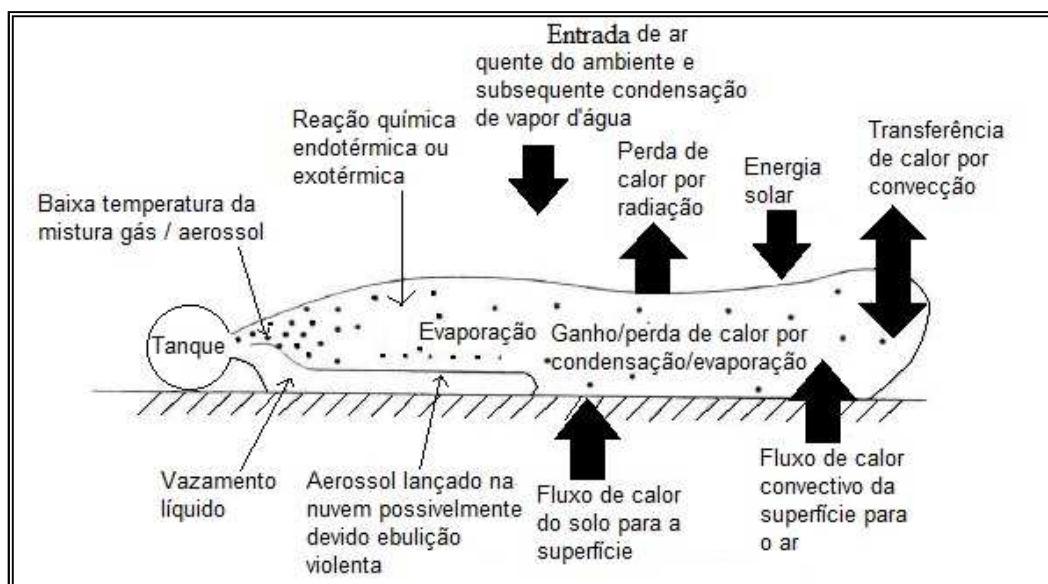
Fonte: Adaptado de Tavares (2011).

Se o único problema da dispersão de uma nuvem densa fosse a etapa de dispersão gravitacional à temperatura ambiente, a questão poderia ser significativamente simplificada.

Entretanto, uma série de fenômenos termodinâmicos como a transferência de calor latente (evaporação de gotículas de líquido e condensação da umidade do ar na nuvem), troca de calor sensível com a superfície (que em função da velocidade da nuvem sobre a superfície do solo e da diferença de temperatura pode ser dominada por convecção livre ou por convecção forçada), possíveis reações químicas exotérmicas e endotérmicas e processos de deposição de partículas da nuvem (chamado *rainout*) podem estar envolvidos no processo, o que o torna ainda mais complexo, conforme ilustrado na Figura 14.

Em função destas considerações, o estudo da dispersão atmosférica de uma nuvem densa decorrente de uma liberação acidental é bastante diferente dos problemas convencionais de dispersão atmosférica e representa um tipo diferente de problema na área da dispersão (BRITTER, 1989).

Figura 14 - Aspectos termodinâmicos na dispersão de nuvem densa.



Fonte: Adaptado de Hanna; Drivas e Chang (1996).

2.2.3 Modelos de dispersão atmosférica de nuvens densas

Conforme Mercer et al (2009) os modelos de dispersão atmosférica de gás denso podem ser classificados em quatro categorias em função da profundidade

com que descrevem os fenômenos envolvidos no processo de dispersão atmosférica conforme está apresentado na Tabela 9 e descrito sucintamente a seguir.

Tabela 9 - Classes de modelos de dispersão atmosférica de gás denso.

Classe	Tipo de modelo
I	Modelos empíricos ou fenomenológicos;
II	Modelos intermediários ou integrais , subdivididos em: <ul style="list-style-type: none"> a) Modelo de blocos (<i>box models</i>); b) Modelos de plumas; c) Modelos integrais de jato; d) Modelos com aproximação de água rasa unidimensionais (<i>shallow layer</i>).
III	Modelos com aproximação de água rasa bidimensionais (<i>shallow layer</i>);
IV	Modelos de fluidodinâmica computacional (CFD).

Fonte: Adaptado de Duijm et al. (1997).

2.2.3.1 Modelos empíricos ou fenomenológicos

Podem ser considerados como os modelos mais simples para a estimativa da evolução de uma nuvem densa em função da distância e do tempo; o modelo de dispersão de Britter e McQuaid apresentado no *Workbook on the dispersion of dense gases* é clássico dentro desta categoria (BRITTER; McQUAID, 1988).

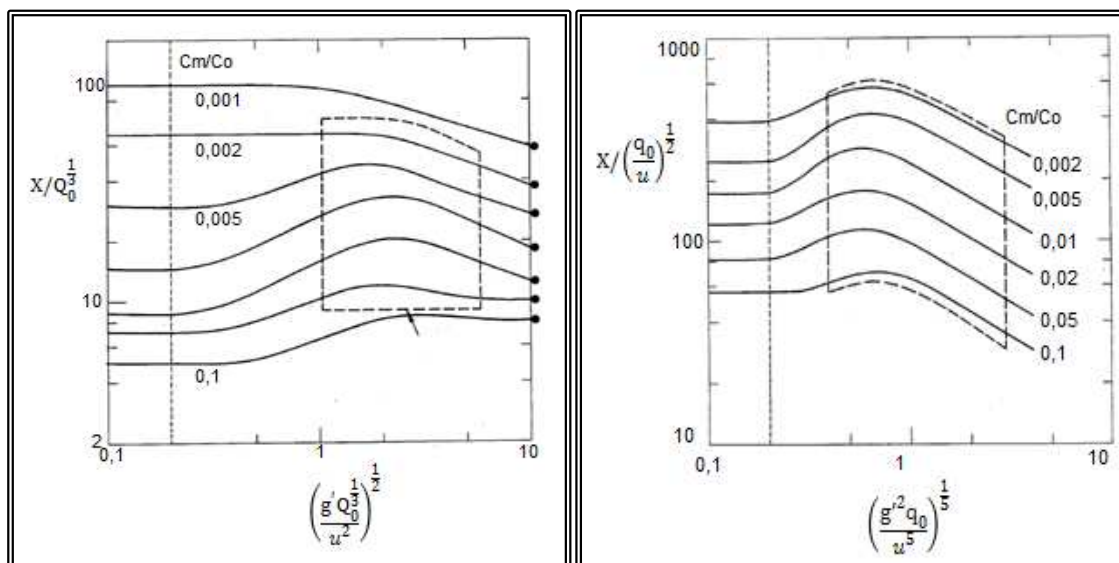
O modelo de dispersão apresentado no *Workbook* ignora complicações relacionadas ao local em que ocorre a liberação e à forma com que a mesma ocorre: obstáculos no trajeto do lançamento, inclinações no terreno, transferência de calor entre o gás e suas vizinhanças, mudanças de fase na nuvem e na atmosfera vizinha, reações químicas, gases não ideais e liberações afastadas do solo.

Assim, o *Workbook* considera variáveis dominantes no processo de dispersão de um gás denso a quantidade de material liberada na atmosfera (volume ou vazão volumétrica, Q_0 ou q_0), a diferença entre a densidade do material e do ambiente (g'), a velocidade média do vento (u) e a dimensão característica da fonte (relação entre altura e diâmetro de nuvem cilíndrica igual a 1, por exemplo, em liberações catastróficas, ou a dimensão da poça, para liberações contínuas).

O modelo consiste em um conjunto de correlações empíricas que determinam as propriedades macroscópicas do processo de dispersão da nuvem calibradas com dados experimentais obtidos principalmente em áreas rurais (Porton

Down e Thorney Island) e em túneis de vento; as correlações são apresentadas na forma de gráficos que permitem ao usuário fazer as estimativas das concentrações para liberações instantâneas e contínuas, conforme ilustrado na Figura 15 (C_m é a concentração média em liberações contínuas ou concentração máxima em liberações instantâneas e C_0 é a concentração inicial do contaminante).

Figura 15 - Correlações do *Workbook* de Britter & McQuaid.



Fonte: Britter e McQuaid (1988).

O modelo de Britter e McQuaid não fornece informação sobre os perfis de concentração na horizontal e na vertical, implicando que esta concentração é uniforme dentro da nuvem.

2.2.3.2 Modelos intermediários ou integrais

Os modelos integrais são modelos desenvolvidos com base nas equações de conservação de massa, energia e momento somente na direção do vento e, em função disto, permitem fazer estimativas rápidas para obtenção dos parâmetros que descrevem a evolução da nuvem (PANDYA; GABAS; MARSDEN, 2012).

Um pressuposto básico neste tipo de modelagem da dispersão é a entrada de ar (*entrainment*) na nuvem e como este processo é modelado ao longo da evolução da mesma na atmosfera (SEINFELD; PANDIS, 2006); a descrição precisa deste processo de entrada de ar na nuvem é um dos problemas mais difíceis de ser

contornado na modelagem de poluição do ar e seu equacionamento é uma das principais fontes de diferença entre os modelos integrais (KHAN; ABBASI, 2000).

Nielsen (1998) apresenta uma coleção destas funções para modelagem de entrada de ar utilizadas em modelos de dispersão de gás denso, nos moldes da função apresentada em Britter (1989) para a entrada de ar pela lateral da nuvem densa, u_E , apresentada na eq. (9), sendo h a altura da nuvem.

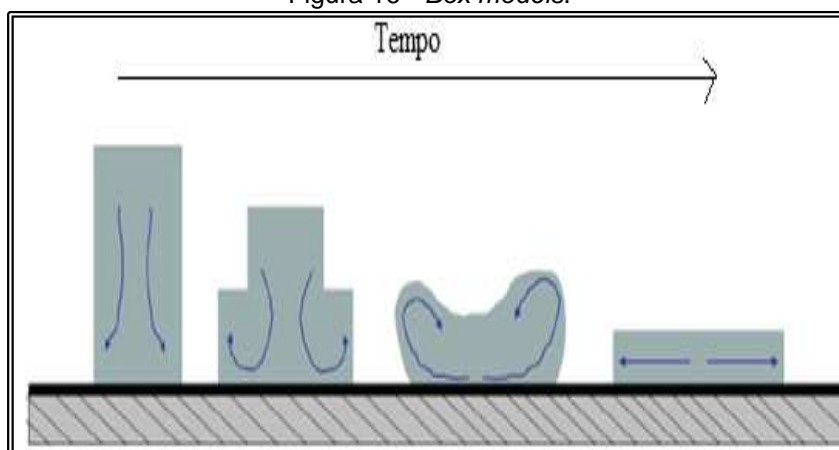
$$\frac{u_E}{u^*} = \frac{k}{1 + 0,125 \cdot \left(\frac{g' \cdot h}{u^{*2}} \right)} \quad (9)$$

A princípio, conforme Ivings et al. (2013), características mais simples de variação de terreno (como inclinações uniformes) podem ser introduzidas na modelagem integral; Luketa-Hanlin (2006) menciona a existência de modelos comerciais com esta capacidade de incorporar efeitos de terreno e obstáculos e Cleaver; Cooper e Halford (1995) apresentam uma série de algoritmos que podem ser incorporados em modelos integrais para inclusão de efeitos de obstáculos, tornando o modelo mais apto a operar em condições reais de dispersão.

Os modelos integrais já provaram ser bem-sucedidos e possuir ampla faixa de aplicabilidade; eles já se mostraram úteis em análise de risco, entretanto, são mais apropriados para a descrição prévia de uma condição acidental do que para a descrição e estudo de um acidente propriamente dito, já ocorrido, o que pode ser feito mais detalhadamente com os modelos tridimensionais (IVINGS et al., 2013).

Os modelos para liberações instantâneas, chamados modelos de blocos (*box models*), assumem como pressuposto básico que a nuvem apresenta a forma inicial de um cilindro plano reto.

O equacionamento para esta situação adota as variações do raio e do volume deste cilindro ao longo do tempo, conforme a Figura 16 e eq. (10), para descrever a dispersão do poluente pela resolução de um conjunto de equações diferenciais ordinárias (CPR14E, 2005), ou seja, equações diferenciais com apenas uma variável independente, como, por exemplo, o tempo neste caso.

Figura 16 - *Box models*.

Fonte: Adaptado de TAVARES (2011).

$$\frac{dV}{dt} = (\pi R^2) u_T + (2\pi R h) u_E \quad (10)$$

onde u_T e u_E são as velocidades de entrada de ar pelo topo e pela lateral da nuvem que cada modelo estabelece como função do estado da nuvem (raio, R , e volume, V) e onde estão as principais diferenças entre os diversos modelos (CPR14E, 2005).

Em situações em que o fluxo é bifásico (mistura líquido-vapor) o modelo deve incluir uma rotina para descrever o equilíbrio entre estas fases e determinar as propriedades da nuvem nestas condições; o modelo de equilíbrio mais adotado nos modelos integrais é o Modelo de Equilíbrio Homogêneo (MEH), recomendado para situações em que as gotículas de líquido na nuvem densa são menores do que $100 \mu\text{m}$; o modelo MEH segue o espírito de modelagem integral, assumindo que as gotículas estão em equilíbrio termodinâmico em uma determinada temperatura e distribuídas estatisticamente em tamanho e ao longo na própria nuvem de forma uniforme ou assumindo um perfil de similaridade (KUKKONEN et al., 1994).

A principal vantagem dos modelos do tipo integral está relacionada à rapidez de execução dos programas, o que permite a simulação de vários cenários acidentais em um espaço de tempo curto quando comparados, por exemplo, aos modelos tipo CFD, conforme Schleder e Martins (2014), o que os coloca como um dos mais aplicados em análise quantitativa de risco, tendo em vista a grande quantidade de cenários acidentais que devem ser considerados.

Apesar da conveniência oferecida quanto à rapidez e facilidade de uso, os coeficientes empíricos exigidos nas soluções das equações diferenciais dos modelos

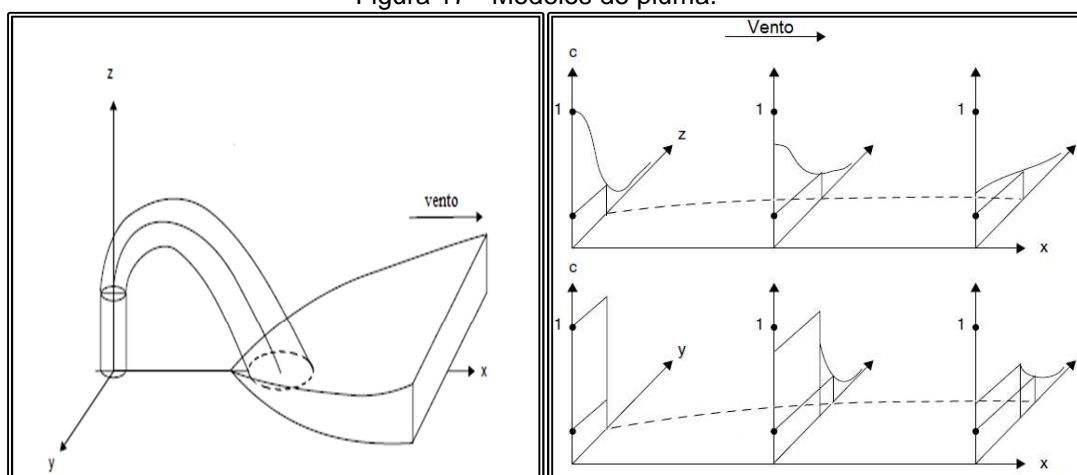
integrals são estabelecidos com base em testes específicos de campo ou de laboratório; desta forma, os resultados obtidos nos modelos são dependentes do conjunto de dados que foram usados na calibração do esquema de cálculo que, geralmente, não abordam a questão de obstáculos na dispersão, além de não abordarem uma variedade grande de substâncias químicas (MERONEY, 2012).

Outro tipo de liberação acidental geralmente estudada com a estratégia de modelo integral são as plumas de superfície que sucedem uma liberação contínua de uma nuvem densa com pressuposto básico de momento inicial baixo na liberação acidental, o que as diferenciam dos modelos integrais de trajetória, onde se aplicam os chamados modelos de pluma superficiais (*grounded plume models*).

Estes modelos podem ser vistos como uma analogia à formulação *box model*, entretanto, a queda gravitacional na direção longitudinal é desprezada e a integração das equações diferenciais ordinárias da modelagem para estimar a evolução da largura da pluma e demais parâmetros da nuvem é feita ao longo da distância no sentido da direção do vento, ao invés do tempo (CPR14E, 2005).

Nos primeiros modelos de pluma contínua era assumido uma pluma com seção transversal retangular, conforme ilustrado na Figura 17, ou gaussiana, com concentração de material e velocidade de advecção constante nesta área.

Figura 17 - Modelos de pluma.



Fonte: Adaptado de CPR 14E (2005).

Os chamados modelos de pluma contínua generalizada, propostos inicialmente por Colenbrander (1980) são uma extensão desta modelagem, onde são associados perfis de similaridade às variações das propriedades da nuvem no eixo vertical e horizontal, Figura 17, como, por exemplo, a equação da difusão

atmosférica, permitindo, assim, uma transição contínua da modelagem de nuvem densa para a modelagem de nuvem passiva e a inclusão na modelagem de uma diversidade maior de processos físicos (WHEATLEY; WEBBER, 1984).

Um tipo importante de liberação acidental possível de ocorrer em uma planta de processo, que também pode ser estudada com a estratégia de modelagem integral, são os chamados jatos de gás ou de líquido, que se caracterizam por velocidades iniciais muito maiores do que a velocidade local do vento; de fato, se a pressão no vaso de armazenagem for o dobro da pressão ambiente, estas velocidades podem alcançar 300 a 400 m/s (HANNA; DRIVAS; CHANG, 1996); nesta situação a trajetória inicial e a dispersão do jato são governadas pela velocidade e pelas altas taxas de entrada de ar no próprio jato.

A abordagem inicial para a dispersão por jatos verticais submetidos à vento lateral foi a teoria da trajetória da pluma proposta por Ooms em 1972 (OOMS, 1972) para o cálculo da dispersão de gases mais leves que o ar, emitidos em chaminés à pressão e temperatura atmosférica (KHAN; ABBASI, 2000) e que origina os chamados modelos integrais unidimensionais de trajetória (VILCHEZ et al., 2002).

Estes modelos assumem perfis simples (forma de cartola (*tophat*) ou gaussiano) para a distribuição das propriedades do jato (temperatura, velocidade e densidade) em sua seção transversal, circular nas primeiras propostas, para produzir as equações diferenciais ordinárias resultantes da integração das equações de conservação nesta seção transversal (DAVIDSON, 1986).

Além disso, incluem também uma equação para a entrada de ar para o fechamento do sistema de equações (exceto no caso específico do modelo Hoot, Meroney e Peterka – modelo HMP, que em função de não considerar a entrada de ar na nuvem não é válido para longas distâncias) (CPR14E, 2005).

Por último, vale frisar que estes modelos de trajetória são restritos às distâncias não mais do que algumas centenas de metros, onde a turbulência interna da pluma é mais importante do que a turbulência atmosférica; para distâncias maiores, o excesso de densidade ou de momento torna-se insignificante perante a influência das condições do ambiente, momento a partir do qual deve se evoluir na modelagem com um MPG ou com de gás denso (HANNA; DRIVAS; CHANG, 1996).

Dentro da classe de modelos integrais estão, ainda, os modelos baseados nas simplificações das equações governantes da dinâmica de fluidos, as Equações de Navier-Stokes, proporcionadas pela chamada aproximação de águas rasas

(*shallow layer equations*); nesta modelagem as propriedades da nuvem são consideradas uniformes na seção transversal da pluma, conforme Figura 20, fornecendo um conjunto de equações ordinárias.

O equacionamento de água rasa difere da modelagem integral de pluma contínua no tratamento dado à conservação da quantidade de momento: o modelo integral usa a equação de frente de gravidade (variação da largura da pluma da Figura 17 na direção do vento), eq. (11), enquanto o equacionamento de água rasa usa o vetor quantidade de momento, conforme a eq. (12) (CPR 14E, 2005).

$$u \frac{db}{dx} = C \sqrt{g' b_z} \quad (11)$$

$$\frac{d(\rho_o u u_y A)}{dx} = 2g' \rho_o A b_z^2 + f_y \quad (12)$$

Onde C é uma constante empírica, b é a meia largura do retângulo que representa a forma da nuvem e b_z é a altura deste retângulo, A é a área da seção reta da pluma ($A=2bb_z$) e f_y é o termo de fricção no eixo y.

A Tabela 10 ilustra as classes de modelos apresentadas acima.

Tabela 10 - Exemplos de modelos tipo integral.

Classe de modelos	Exemplos
Box models	Eidsvik (EIDSVIK, 1980), ALOHA (JONES et al., 2013), HEGABOX (PUTTOCK, 1987), UDM (HARPER; WITLOX; 2011), DEGADIS (SPICER; HAVENS, 1989), DRIFT (TICKLE; CARLISLE, 2008).
Modelos de plumas	Cox (COX, 1980), ALOHA (JONES et al, 2013), HEGADAS (WITLOX, 1994), DEGADIS (SPICER; HAVENS, 1989), GASTAR (CERC, 2009), UDM (HARPER; WITLOX, 2011), DRIFT (TICKLE; CARLISLE, 2008), Fay e Zemba (FAY; ZEMBA, 1986).
Modelos de jatos	Ooms (OOMS,1972); HMP (HOOT; MERONEY; PETERKA, 1973); Epstein (EPSTEIN, 1990); Khan e Abbasi (KHAN; ABBASI, 2000); Chen e Rodi (CPR14E, 2005).
Modelos de águas rasas unidimensionais	Zeman (ZEMAN, 1982); SLAB (ERMAK, 1990).

Um aspecto interessante na modelagem da dispersão atmosférica de gás denso verificado durante a revisão bibliográfica é o que diz respeito à genealogia dos modelos: o modelo HEGADAS/ HEGABOX, creditado a Colenbrander e Puttock (1983) deriva do modelo proposto por Riele (1977) e Colenbrander (1980); Witlox (1991) modifica esta abordagem; por sua vez, o HGSYSTEM, Puttock (1991), (FTHENAKIS, 1999), foi uma extensão do HEGADAS para a substância fluoreto de hidrogênio (que é mais leve do que o ar!); o modelo DEGADIS, creditado a Havens & Spicer, também deriva do modelo HEGADAS; O ALOHA-DEGADIS deriva diretamente do DEGADIS (MERCER et al., 1998).

Por outro lado, o modelo UDM deriva da ideia inicial de Cox e Carpenter (1980), que segue o trabalho de Cox e Roe (1977), e, conseqüentemente, a proposta inicial de van Ulden (1974), que iniciou os trabalhos sobre gases densos.

Os modelos usados nesta dissertação pertencem ao grupo dos modelos integrais: o Unified Dispersion Model (UDM), o ALOHA-DEGADIS e o SLAB.

Estes modelos estão entre os mais usados na elaboração de análise quantitativa de risco e na área de prevenção de perdas na indústria de processos, sendo considerados confiáveis dentro de seus aspectos de desenvolvimento (LICARI, 2010; PONTIGGIA et al., 2010).

A seguir é feita uma descrição sucinta das características de cada um deles.

Unified Dispersion Model (UDM)

O Unified Dispersion Model (UDM) é um modelo de similaridade integral avançado desenvolvido pela Det Norske Veritas (DNV) executado no *Process Hazards Analysis Software Tool* ou Phast (WITLOX; HARPER, PITBLADO, 2013).

O UDM é um modelo do tipo integral, onde um conjunto de equações diferenciais ordinárias para a nuvem e para as gotículas de líquido (descrevendo a trajetória, a evaporação e o balanço de energia) é integrado para fornecer as variáveis que caracterizam a sua dispersão na direção do vento, em função da distância, para liberação contínua, ou do tempo, para a instantânea (PHMSA, 2011).

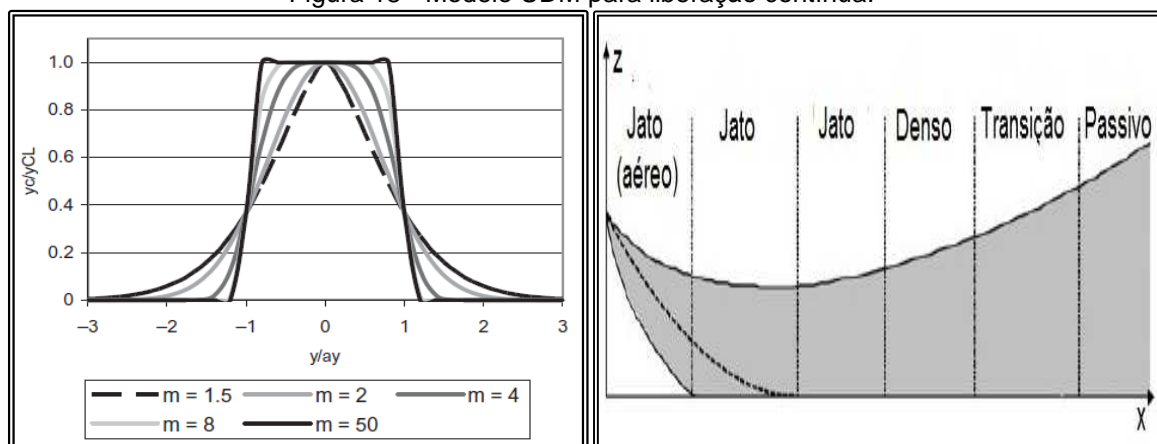
As variáveis básicas na dispersão da pluma são o fluxo de massa ou a massa da nuvem (massa do contaminante, ar seco e água), a posição, o momento e a sua temperatura que são obtidas pela aplicação das leis de conservação e da relação entre a velocidade e posição da pluma (HARPER; WITLOX, 2011).

O UDM modela uma ampla faixa de cenários: variações de momento (liberações pressurizadas e atmosféricas), variações com o tempo da liberação (duração finita, instantânea ou intermitente), variações de densidade (nuvem passiva ou densa), variações na direção da liberação (vertical, horizontal ou angular), comportamentos termodinâmicos (pluma isotérmica, quente ou gelada, vapor ou líquido, nuvens multifásicas), com ou sem reação química, efeitos de terreno (terra ou água, terreno plano com rugosidade uniforme) e condições ambientais (condição estável, neutra ou instável) (PANDYA; GABAS; MARSDEN, 2012).

As condições da liberação podem ser especificadas com base na temperatura e pressão do material ou na condição de líquido saturado correspondente; a fase a ser liberada (vapor, líquido ou líquido-vapor) é gerada automaticamente no *software* conforme estas condições fornecidas pelo usuário.

O UDM modela as diferentes fases da nuvem ao longo da distância ou do tempo; no caso de um vazamento contínuo de gás denso: fase de jato (elevado, descendente e ao nível do solo), que domina o processo em seu início, fase densa, a fase de transição, incluída para evitar a descontinuidade no processo, e a fase de dispersão passiva tipo gaussiana em longas distâncias, ilustradas na Figura 18.

Figura 18 - Modelo UDM para liberação contínua.



Fonte: Adaptado de Harper e Witlox (2011).

As concentrações na vertical e ortogonal à direção do vento para uma liberação em regime permanente, por exemplo, são baseadas no perfil de similaridade apresentado nas eq. (13), (14) e (15), que segue a sugestão usada no modelo DRIFT (TICKLE; CARLISLE, 2008), conforme Woodward e Pitblado (2010):

$$C(x,y,\xi)=C_o(x)F_v(\xi)F_h(y) \quad (13)$$

$$F_v(\xi)=\exp\left\{-\left|\frac{\xi}{R_z}\right|^n\right\} \quad (14)$$

$$F_h(y)=\exp\left\{-\left|\frac{y}{R_y}\right|^m\right\} \quad (15)$$

onde ξ é a distância perpendicular à linha central da pluma, R_y e R_z são os coeficientes de dispersão horizontal e vertical; o coeficiente m no perfil horizontal começa em valores altos, $m=50$, e diminui gradualmente para $m=2$, o que corresponde ao perfil gaussiano, ou até menores $m=1,5$ conforme evolui a densidade relativa da pluma; assim, conforme m varia, o perfil de concentração muda de um perfil *top hat* para um perfil mais abaulado, ilustrado na Figura 18; o coeficiente n usado no perfil vertical é função da classe de estabilidade e da altura efetiva da nuvem em cada posição x .

Quanto ao perfil de vento, o UDM se limita a simular perfil de vento em regime permanente e não é capaz de modelar velocidades ou direções de vento transientes; este pressuposto geralmente é suficiente para a análise de risco, porém, limita a validação contra dados experimentais, onde os resultados são afetados pelas variações de velocidade e direção de vento (PHMSA, 2011).

O UDM é limitado no que se refere à especificação da rugosidade da superfície, não permitindo a consideração de terrenos com comprimentos de rugosidade de superfície variada na modelagem da dispersão.

Quanto à estabilidade atmosférica, o UDM modela estabilidades atmosféricas estáveis, neutras e instáveis aplicando as classes de Pasquill.

O modelo UDM não modela explicitamente a turbulência gerada no campo de fluxo devido à presença de obstruções e não pode levar em consideração as mudanças no campo de fluxo devido a obstáculos maiores do que a nuvem.

O modelo exige o atendimento a quatro critérios para a transição de regime denso para passivo: velocidade da nuvem próxima à velocidade do vento; densidade da nuvem próxima à densidade do ar ambiente (0,015); entrada de ar passiva próxima da entrada total de ar e número de Richardson menor que um valor crítico de 15 (HARPER; WITLOX, 2011).

ALOHA-DEGADIS

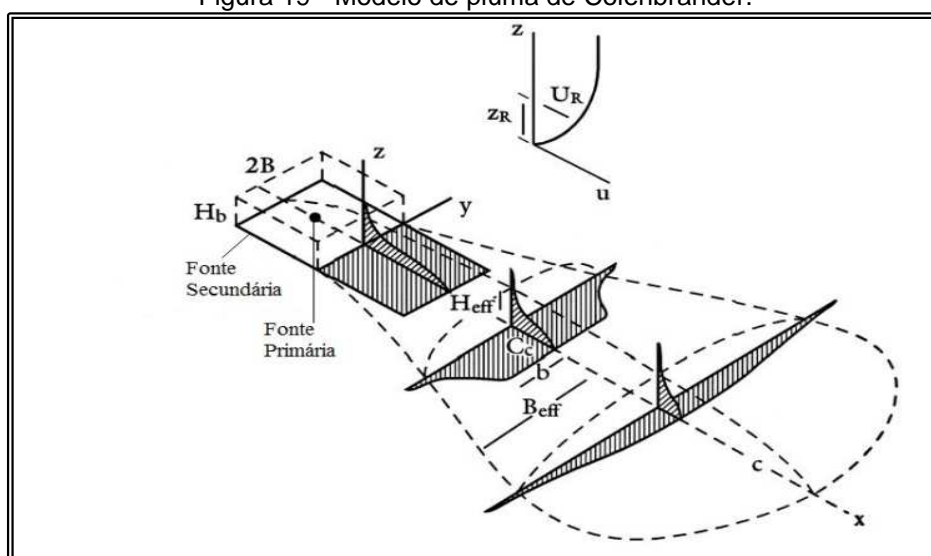
O ALOHA-DEGADIS, derivado do modelo DEGADIS, como indica o próprio nome, é o modelo de dispersão de gás denso embutido no *software* livre ALOHA; o modelo DEGADIS é um modelo para dispersão atmosférica de nuvens densas desenvolvido por Havens & Spicer na Universidade de Arkansas adaptando os conceitos do modelo matemático HEGADAS, proposto por Colenbrander (1980) e Colenbrander e Puttock (1983) (OFCM, 2001).

O modelo DEGADIS foi proposto inicialmente para simular a dispersão de liberações ao nível do solo com momento zero; em 1988, os autores incorporam o modelo unidimensional de trajetória desenvolvido por Ooms (HAVENS, 1988).

O *software* é livre e seus códigos e arquivos executáveis abertos, o que permite que o usuário faça alterações na execução do mesmo, mas que, por outro lado, dificulta a rastreabilidade de versões do código.

A característica peculiar do DEGADIS, já presente na modelagem original de Colenbrander, 1980, é o modelo secundário de fonte, que consiste de uma capa de vapor sobre a fonte primária e que, de fato, é quem alimenta a pluma acima dela, mas que não sofre advecção; o modelo assume um perfil exponencial para a velocidade do vento e funções de similaridade gaussiana na horizontal e exponencial na vertical (HAVENS, 1988) ilustrados na Figura 19 e na eq. (16).

Figura 19 - Modelo de pluma de Colenbrander.



Fonte: Adaptado de Jones et al. (2013).

$$C(x,y,z)=\begin{cases} C_c(x)\exp\left[-\left(\frac{|y|-b(x)}{S_y(x)}\right)^2 - \left(\frac{z}{S_z}\right)^{1+n}\right], & |y|>b(x) \\ C_c(x)\exp\left[-\left(\frac{z}{S_z}\right)^{1+n}\right], & |y|\leq b(x) \end{cases} \quad (16)$$

onde S_y e S_z são os parâmetros de dispersão lateral e vertical, respectivamente, b é a metade da largura da parte homogênea central e $C_c(x)$ a concentração na linha central da pluma ao nível do solo (MAZZOLDI; HILL; COLLS, 2008).

O modelo foi validado contra dados dos testes Burro / Coyote, Maplin Sands e Thorney Island conforme Spicer e Havens (1987).

No modelo DEGADIS, o comprimento de Monin-Obukhov é calculado com base na classe de estabilidade atmosférica de Pasquill-Guifford fornecida pelo usuário; não podem ser alimentados perfis de turbulência ou de temperatura; a classe F de estabilidade pode ser modelada, mas pode não ser manipulada adequadamente no modelo e resultar em subestimação de áreas (FERC, 2011).

O modelo DEGADIS simula perfil de vento em regime permanente e não é capaz de simular direções ou velocidades de ventos transientes; velocidades de vento baixas (menor do que 2 m/s) podem ser modeladas, mas podem resultar em valores subestimados (FERC, 2011); em Havens e Spicer (1996) é apresentado um estudo de sensibilidade do modelo à velocidade de vento.

As simulações no modelo DEGADIS são restritas às dispersões que acontecem em terrenos sem obstruções e planos com comprimento de rugosidade constante; uma rugosidade de superfície maior fornecida ao modelo, geralmente resulta em menores concentrações na direção do vento (FERC, 2011).

Segundo Jones et al. (2013), o DEGADIS foi selecionado para fazer a estimativa de dispersão de gás pesado no *software* ALOHA em função de sua aceitação geral e pelos testes extensos realizados pelos autores (SPICER; HAVENS, 1987); entretanto, algumas simplificações foram introduzidas, como em alguns métodos numéricos; de uma forma sucinta, o ALOHA-DEGADIS é o modelo de pluma em regime permanente do DEGADIS habilitado também para trabalhar com liberações intermitentes, tornando o diferente do DEGADIS original.

Ainda segundo Jones et al. (2013), os resultados de testes comparativos entre os dois modelos mostraram que o ALOHA-DEGADIS fornece resultados um pouco mais conservativos (em torno de 10%) em relação ao DEGADIS original.

O modelo de dispersão ALOHA-DEGADIS é bastante utilizado em trabalhos de análise de risco; os trabalhos de Vilchez et al. (2002), Bubbico e Mazzarotta (2008), sobre a influência de parâmetros governantes da dispersão atmosférica com várias substâncias químicas, o de Hanna et al. (2009), estudando a dispersão atmosférica do gás denso cloro em área industrial e área urbana, o trabalho de Zhou e Liu (2012) e o de Sengupta et al. (2015) que utilizaram o ALOHA como modelo de consequência para estimativas de risco podem ser consultados para aprofundamento no mesmo.

SLAB

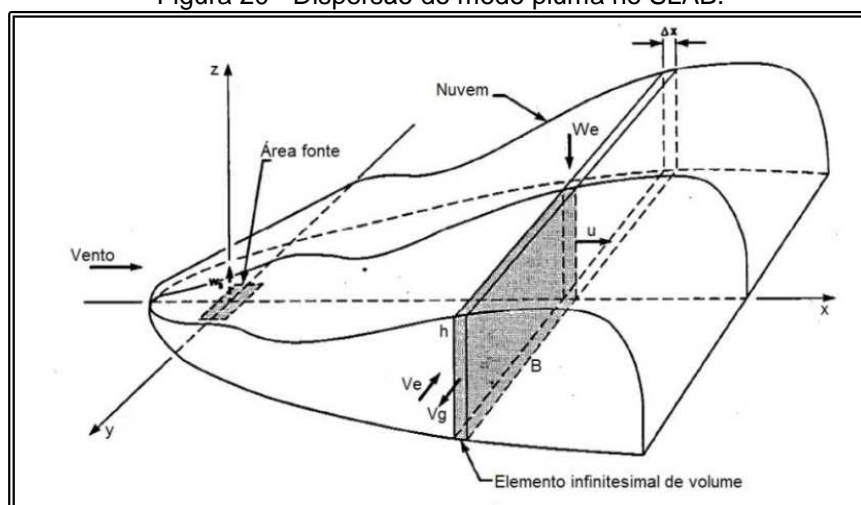
Conforme Ermak (1990), o SLAB é um modelo computacional que simula a dispersão atmosférica de liberações de materiais mais densos do que o ar; os tipos de liberações que podem ser tratadas pelo modelo incluem a evaporação de poças, jatos horizontais elevados, jatos verticais elevados e fontes instantâneas volumétricas; com exceção da fonte evaporação de poça, que é considerada como sendo fonte somente de vapor, as demais possibilidades de liberação podem ser formadas ou por vapor puro ou por misturas de vapor e gotículas de líquidos.

O modelo SLAB é baseado nos conceitos de entrada de ar na nuvem de gás denso seguida pelo espalhamento gravitacional (*gravity spread*) desta nuvem apresentados originalmente por Zeman (1982), sendo uma aplicação decorrente da aproximação de águas rasas (*shallow layer*) (BRITTER, 1998).

Segundo Ermak (1990) a dispersão atmosférica da liberação acidental é modelada com base na solução simplificada das equações de conservação de massa (global e para o componente), de momento e de energia em duas formas diferentes para fornecer as propriedades médias espaciais da nuvem associadas às duas formas básicas de liberação: plumas ou *puffs*.

Quando a liberação é modelada como uma pluma em regime permanente, o modelo adota a média na direção transversal ao vento (y e z) como um argumento usado para gerar equações diferenciais que sejam função somente da coordenada na direção do vento (x), conforme Figura 20, impondo a condição de regime permanente nas equações de conservação.

Figura 20 - Dispersão do modo pluma no SLAB.



Fonte: Adaptado de ERMAK (1990).

A forma das equações no modo *puff* no SLAB considera a média nas três direções espaciais (x , y e z), deixando o tempo como única variável independente.

A estrutura teórica do modelo SLAB é concluída pela inclusão de uma equação de estado (lei dos gases ideais) e uma equação para o aumento das dimensões da nuvem (largura da pluma no modo pluma em regime permanente e comprimento e largura do *puff* no modo de *puff* transiente).

Os aspectos termodinâmicos associados à formação e evaporação de gotículas de líquidos são modelados com uma aproximação de equilíbrio que impõe que a pressão parcial da fase vapor seja igual à pressão de saturação até que se evapore todo líquido e que as gotículas são minúsculas o suficiente para considerar a mistura como monofásica, não considerando, assim, os aspectos de deposição das mesmas.

O perfil de similaridade de concentração do SLAB adota funções gaussianas e exponenciais dadas pela eq. (17), eq. (18) e eq. (19):

$$C(x,y,z) = 2BhC(x)C_1(y,b,\beta)C_2(z,Z_c,\sigma) \quad (17)$$

$$C_1(y,b,\beta) = \frac{1}{4b} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{y+b}{\sqrt{2\beta}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y-b}{\sqrt{2\beta}}\right) \right] \quad (18)$$

$$C_2(z,Z_c,\sigma) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sigma} \left[\exp\left(-\frac{(z-Z_c)^2}{2\sigma^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+Z_c)^2}{2\sigma^2}\right) \right] \quad (19)$$

onde B é a metade da largura da pluma, com parâmetros b e β , e h a altura da pluma, com parâmetros Z_c e σ (ERMAK, 1990).

O conceito de entrada de ar (V_e e W_e) é fundamental na estrutura do SLAB, entretanto, a escolha do submodelo para representar esta entrada de ar não é um aspecto fundamental para o modelo, ou seja, é possível adotar diferentes modelos de entrada de ar na nuvem sem alterar o modelo SLAB como um todo.

No caso de jatos verticais, o SLAB inclui o modelo HMP (HOOT; MERONEY E PETERKA, 1973) para o cálculo da elevação máxima da pluma, que serve como entrada para este modelo de dispersão.

O modelo é mais aplicado para dispersão de gás denso, embora seja possível sua aplicação para jatos de densidade igual ou menor do que o ar fazendo uso do modelo de Briggs para o cálculo da altura máxima de jatos (ERMAK, 1990).

Existem vários trabalhos com a aplicação do modelo SLAB, entre os quais pode-se citar o de Sklavounos e Rigas (2006), que simula as condições de dispersão de gás natural liquefeito (GNL) nos testes da Série Coyote (1981) e o de Hanna et al. (2012), sobre a dispersão atmosférica de cloro e amônia no experimento de Jack Rabbit no deserto de Utah em 2010 (HANNA et al., 2012).

O modelo de dispersão SLAB é um modelo livre e um dos modelos mais utilizados em análise de risco, estando implantado nos *softwares* RISKAN (RISKAN, 2000), SUPERCHEMS (MELHEM, 2006) e o Effects (TNO, 2003).

2.2.3.3 Modelos bidimensionais baseados na aproximação de águas rasas

Um conceito central nesta estratégia de modelagem é o de corrente de gravidade ou corrente de densidade, fenômeno que se forma quando, na convivência entre dois fluidos com densidades diferentes, o mais pesado tende a fluir sob o mais leve; existem vários fenômenos naturais que são exemplos destas chamadas correntes de gravidade: tempestades, avalanches, deslizamentos de terra em encostas ou correntes marítimas.

Assim, quando acontece a liberação de uma massa de gás mais pesada do que o ar nas proximidades do solo, a gravidade força a massa densa a se espalhar horizontalmente formando a corrente de gravidade; a frente da corrente é caracterizada por uma ponta elevada, a sua cabeça, de fluido altamente turbulento onde ocorre principalmente a mistura com o ar (ZEMAN, 1982).

Uma das abordagens usadas para simplificar a modelagem de escoamentos de fluidos em fenômenos com correntes de gravidade ou de densidade é a aproximação denominada de águas rasas (*shallow water*), introduzida inicialmente por De Saint Venant em 1864 e Boussinesq em 1872 para descrever a dinâmica de um fluido incompressível com densidade constante em termos da altura e das velocidades horizontais, adaptada para a diluição do gás denso na atmosfera.

Segundo Luketa-Hanlin (2006), os modelos que adotam a aproximação das equações de águas rasas usam o fato de que a dimensão lateral da nuvem é muito maior do que a dimensão vertical, principalmente em velocidades baixas de vento: esta relação está em torno de 10^{-2} a 10^{-3} em uma nuvem densa (FANNELOP, 1994).

Nestes modelos, as variáveis médias ao longo da altura da nuvem são resolvidas nas duas dimensões laterais usando as equações de conservação (BRITTER, 1998); são adotadas correlações empíricas para a determinação das taxas de entrada de ar na nuvem de forma análoga aos modelos integrais unidimensionais, como o modelo proposto por Eidsvik (EIDSVIK, 1980), por exemplo.

Segundo Hankin (2003) os modelos bidimensionais baseados nas equações de águas rasas para dispersão de gás denso são realísticos fisicamente, mais baratos computacionalmente e adequados para o uso em análise de risco.

A abordagem é um meio termo entre a complexidade da modelagem fluidodinâmica (CFD) e a feita com modelos integrais; é particularmente adequado para avaliar o efeito de terrenos complexos, porque as forças de empuxo em planos inclinados podem ser incluídas no modelo (BRAMBILLA et al., 2009).

Uma desvantagem associada aos modelos do tipo água rasa é a necessidade de uma capacidade computacional maior em relação aos modelos integrais; em um contexto de avaliação de risco, estes modelos, talvez, sejam usados mais apropriadamente como complemento aos modelos integrais (HANKIN, 2003).

A Tabela 11 ilustra alguns modelos desta classe.

Tabela 11 - Modelos de água rasa bidimensionais.

Modelo	Referência
DISPLAY 2	(VENETSANOS et al., 2003)
TWODEE	(HANKIN; BRITTER, 1999)
SLAM	(BRITTER, 1998)

2.2.3.4 Modelos de mecânica dos fluidos computacional (CFD)

Os modelos chamados integrais não são capazes de possibilitar a inclusão de questões referentes à presença de obstáculos no campo em que ocorre a dispersão em seu equacionamento, não obstante, apresentem as vantagens de uma modelagem rápida da dispersão (PANDYA; GABAS; MARSDEN, 2012).

Assim, conforme Luketa-Hanlin (2006) e Pandya; Gabas e Marsden (2012), os códigos de mecânica dos fluidos computacional passam a ser empregados na modelagem do fenômeno da dispersão de gases densos em liberações acidentais no intuito de incluir os chamados efeitos do terreno – ambientes urbanos, vales, cotas elevadas - e grandes obstáculos no estudo da dispersão.

Conforme Middha et al. (2010), Pontiggia et al. (2010) e Pandya; Gabas e Marsden (2012) os modelos do tipo CFD exigem uma capacitação maior do usuário e recursos computacionais muito maiores; em contrapartida, permitem uma descrição mais detalhada do processo de dispersão atmosférica.

A abordagem fluidodinâmica fundamenta-se na resolução simultânea das equações diferenciais parciais que descrevem a conservação de massa, momento e energia, as chamadas equações de Navier-Stokes, permitindo uma análise tridimensional completa dos aspectos envolvidos na dispersão atmosférica, sendo, em função disto, considerada a abordagem que proporciona a descrição mais completa dos fenômenos envolvidos no processo (KOOPMAN; ERMAK, 2007).

Dentro da própria classe de modelos CFD, existem códigos que apresentam diferentes áreas de aplicabilidade: alguns são mais adequados para modelagem de incêndio, como o FDS, por exemplo, outros mais adequados para explosões, como o FLACS, por exemplo, podendo, desta forma apresentar estratégias para a resolução das equações de Navier-Stokes também diferentes.

Segundo Pandya; Gabas e Marsden (2012) os modelos do tipo CFD resolvem completamente o campo de velocidade do vento, diferentemente do que ocorre na classe de modelos integrais, onde esta velocidade assume um valor constante ou é incluída na modelagem com sendo função da altura.

A turbulência atmosférica nas simulações em CFD pode ser modelada pelo método das equações médias de Reynolds (RANS) ou simuladas completamente pelo método da simulação numérica direta (DNS), que exige maior capacidade computacional; existe ainda a possibilidade de uma solução intermediária pelo método da simulação das grandes escalas (LES); os modelos comumente

empregados em análise de risco utilizam o método RANS adotando o modelo de fechamento de turbulência de duas equações “ $k - \epsilon$ ” ou o modelo do comprimento de mistura (MAZZOLDI; HILL; COLLS, 2008; PONTIGGIA et al., 2010).

Apesar das dificuldades apontadas, este tipo de modelo começa a desempenhar um papel mais importante na análise de risco de processo industriais, principalmente pela capacidade de permitir a descrição do impacto de sistemas de barreiras e dos efeitos gerados por variações de terreno em que ocorre a dispersão.

Luketa-Hanlin (2006) indica que as aproximações e pressupostos assumidos para a modelagem da turbulência e os efeitos de empuxo dos gases são algumas das limitações dos códigos de CFD; o autor acrescenta que estes códigos são os mais caros computacionalmente, porém, com a capacidade de processamento atual, podem ser executados em até mesmo em computadores pessoais.

Por último, Middha et al. (2010) chamam atenção à cautela antes da aplicação de um código de CFD em avaliações de risco: a cautela citada pelo autor se refere à necessidade de que o código seja validado adequadamente para que tenha capacidade real de previsão na dispersão atmosférica.

Trabalhos relevantes de aplicação de CFD na modelagem da dispersão atmosférica de gás denso incluem o de Pontiggia et al. (2010), que avalia a influência de geometrias complexas na dispersão de amônia, incluindo na modelagem um modelo para dose tóxica com função proibit; o trabalho de Sun et al. (2013), que simula os experimentos com gás natural de Burro chegando ao erro médio relativo em torno de 20% e o trabalho de Schleder e Martins (2014), que comparam os tempos exigidos nas simulações CFD e modelos integrais.

Exemplos desta classe de modelos estão ilustrados na Tabela 12.

Tabela 12 - Modelos tipo CFD.

Modelo	Referência
OpenFOAM	(GREENSHIELDS, 2015)
FLUENT	(KISA; JELEMENSKÝ, 2009)
FDS	(McGRATTAN et al., 2008)
FLACS	(HANSEN et al. 2010)

2.2.3.5 Modelos Lagrangeanos

Para finalizar esta seção cabe, ainda, mencionar a existência de uma classe de modelos que começou a ser empregada na modelagem da dispersão atmosférica de gases densos em liberações acidentais mais recentemente, não obstante, já há muito tempo sejam adotadas na modelagem de dispersão atmosférica de nuvens passivas ou neutras: os modelos Lagrangeanos; estes modelos ganham espaço a partir da década de 1990 para contornar a questão da alta demanda computacional exigida pelos modelos de fluidodinâmica (KOOPMAN; ERMAK, 2007).

Assim, modelos Lagrangeanos de dispersão de partículas baseados na equação de Langevin de velocidade aleatória e já com capacidade para lidar com a presença de obstáculos no caminho da dispersão são modificados de forma a incluir os efeitos inerentes à dispersão gravitacional (LEE; KIM; KO, 2007).

Desta forma, estes modelos adaptados são capazes de considerar plumas com e sem momento inicial (horizontal, vertical ou oblíquo), efeitos de empuxo negativo, liberações ao nível do solo ou elevadas, contínuas, instantâneas ou intermitentes e o espalhamento no solo devido à gravidade (ANFOSSI et al., 2010).

Uma outra abordagem são os modelos Lagrangeanos de dispersão de *puff* também originalmente desenvolvimentos para simular a dispersão de gases neutros e que são estendidos para incluir os efeitos de dispersão gravitacional; os modelos Lagrangeanos de *puff* adotam modelos de fechamento de segunda ordem para o equacionamento matemático da turbulência (SYKES; CERASOLI; HENN, 1999).

A Tabela 13 cita alguns modelos desta classe.

Tabela 13 - Modelos Lagrangeanos.

Modelo	Referência
SCIPUFF	(SYKES; CERASOLI; HENN, 1999)
ADIPIC	(KOOPMAN; ERMAK, 2007)
ARRISK	(GARIAZZO; PELLICIONI; BRAGATTO, 2012)

Concluindo esta seção, a Tabela 14 identifica comparativamente as principais características dos modelos do tipo integral e do tipo fluidodinâmica computacional (CFD), que são os modelos mais utilizados em análise de risco, e a

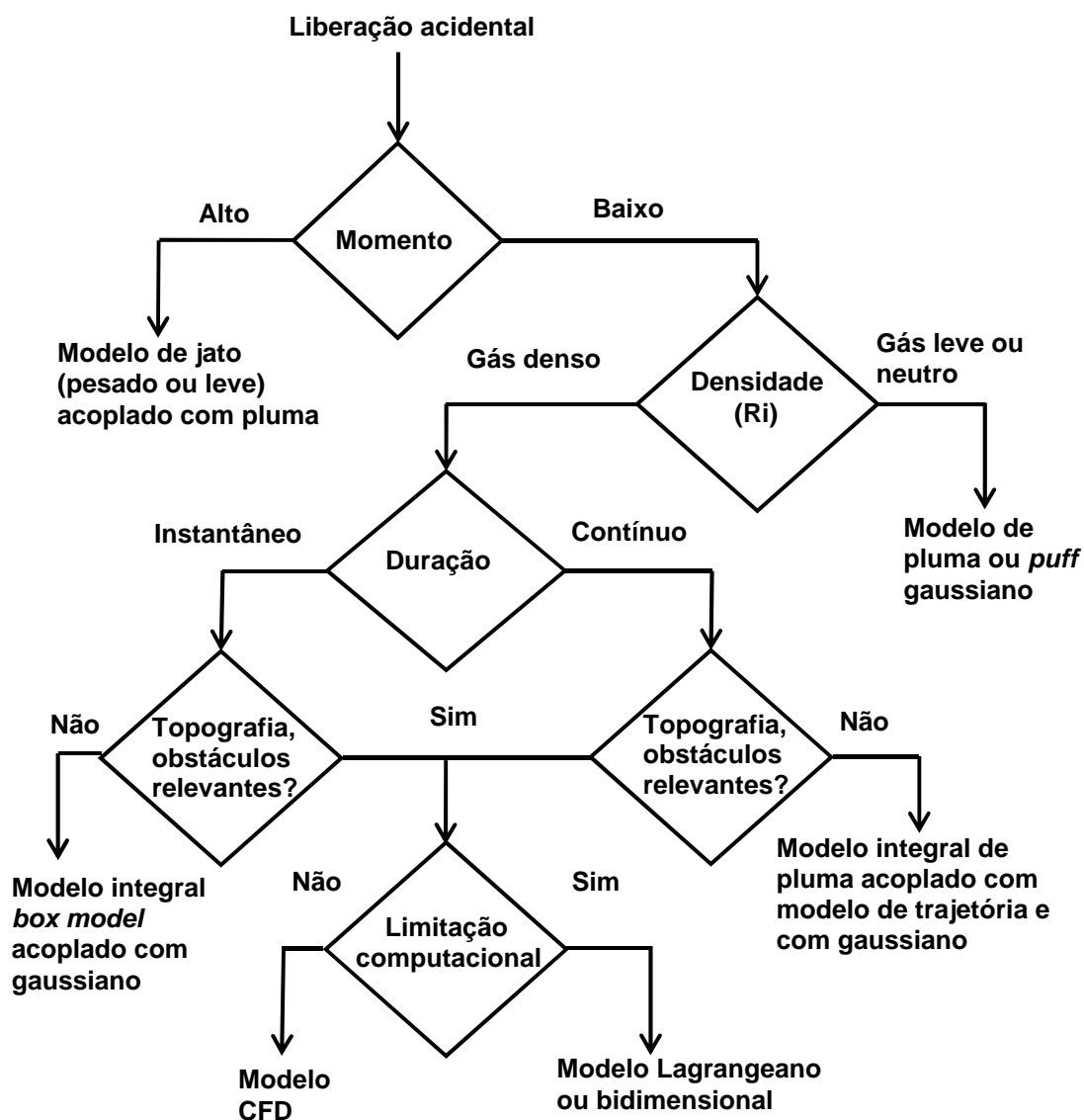
Figura 21 apresenta um fluxograma que direciona a escolha do modelo adequado baseado nas características de momento e densidade apresentada pela nuvem de contaminante e nível de detalhe exigido na modelagem da dispersão atmosférica.

Tabela 14 - Desempenho potencial dos modelos de dispersão.

Aspecto	Modelo Integral	Modelo CFD
Pressuposto principal do modelo	Taxa de entrada de ar	Fechamento da turbulência
Dispersão em terreno plano	Boa	Boa
Dispersão em obstáculos	Impossível	Possível, mas com dificuldade
Efeitos da transferência de calor na superfície	Boa	Boa

Fonte: Adaptado de Meroney (1987).

Figura 21 - Fluxograma da modelagem da dispersão atmosférica em AQR.



2.3 AVALIAÇÃO DE MODELOS DE DISPERSÃO

Segundo Seinfeld e Pandis (2006) os modelos de transporte de produtos químicos na atmosfera são avaliados pela comparação entre suas previsões e as medidas obtidas experimentalmente.

Assim, uma série de parâmetros estatísticos pode ser usada para avaliar o desempenho de um modelo comparando os valores previstos no mesmo e os valores observados em testes de campo ou laboratório (LICARI, 2010; MAZZOLDI; HILL; COLLS, 2008); um sistema de avaliação deste tipo está apresentado por IVINGS et al. (2013) e ilustrado na Tabela 15:

Tabela 15 - Parâmetros de avaliação estatística.

Parâmetro estatístico	Fórmula	Descrição
Erro médio relativo	$MRB = \left\langle \frac{C_m - C_p}{\frac{1}{2}(C_p + C_m)} \right\rangle$	Desvio em relação à média.
Erro médio relativo quadrático	$MRSE = \left\langle \frac{(C_m - C_p)^2}{\frac{1}{4}(C_p + C_m)^2} \right\rangle$	Nível de desvio da média de super e sub estimativas.
Média geométrica	$MG = \exp \left\langle \log_e \frac{C_m}{C_p} \right\rangle$	Média geométrica de todas as amostras.
Fator de 2	$FAC2 = 0,5 \leq \frac{C_p}{C_m} \leq 2,0$	Fração das previsões que está dentro de um fator de 2 em relação aos pontos experimentais.

Fonte: Adaptado de Ivings et al. (2013).

onde C_m e C_p são, respectivamente, as concentrações medidas em campo e previstas pelos modelos; os colchetes indicam a média de todos os sensores e experimentos; assim, um modelo perfeito teria o seguinte desempenho: $-0,4 < MRB < 0,4$; $MRSE < 2,3$; $0,7 < MG < 1,5$ e $FAC2$ de 50% no mínimo.

Os trabalhos a seguir merecem ser citados no que se refere à comparação de desempenho de modelos de dispersão de nuvens densas.

O trabalho de Woodward et al. (1982) que comparou modelos de dispersão atmosférica tridimensionais contra modelos integrais nas estimativas da dispersão de misturas freon/ar dos testes de Porton Down e com GNL em Matagorda Bay,

concluindo que os modelos apresentaram resultados semelhantes para os sensores mais distantes da fonte, enquanto que, para os sensores mais próximos da fonte, os modelos de fluidodinâmica tiveram melhor desempenho.

Hanna; Chang e Strimaitis (1993) em um trabalho iniciado dois anos antes, (HANNA; STRIMAITIS; CHANG, 1991), compararam quinze modelos de dispersão: sete disponíveis publicamente, seis modelos comerciais e dois modelos analíticos incluídos como referências (o modelo de pluma gaussiana e o de Britter e McQuaid).

Os autores compararam as previsões obtidas nos modelos contra os dados de oito testes experimentais de campo envolvendo a liberação contínua de gás denso (gás natural liquefeito em Burro e Coyote, amônia no Deserto de Tortoise, ácido fluorídrico em Goldfish e GNL e GLP em Maplin Sands), a liberação contínua de gás passivo (Prairie Grass Hanford) e a liberação instantânea de gás denso (Thorney Island); os autores concluem que alguns modelos apresentaram melhor desempenho tanto para os conjuntos de dados de liberações contínuas quanto para liberações instantâneas, com um desvio médio de 30 a 50% entre os resultados.

Brighton et al. (1994) fizeram uma comparação entre diferentes códigos *box models* para liberações instantâneas concluindo que existem diferenças significativas entre os códigos, mesmo quando os mesmos são parametrizados com base no mesmo conjunto de testes experimental; o estudo conclui, entre outras coisas, que a maior diferença entre os modelos ocorre em baixa velocidade de vento, com estabilidade de Pasquill F e comprimentos de rugosidade altos, ressaltando a falta de dados de campo exatamente nestas condições.

O Model Evaluation Group (MEG), estabelecido na Europa no início da década de 90, publicou um guia sobre avaliação de modelos de dispersão (PETERSEN, 1999), posteriormente aprofundado no projeto *European Union Scientific Evaluation of Dense Gas Dispersion Models – SMEDIS*, que produziu um relatório mais detalhado sobre avaliação de modelos de dispersão de gás denso incluindo efeitos complexos (aerossol, terrenos, obstáculos), avaliação científica e validação destes modelos (IVINGS et al., 2013).

Sklavounos e Rigas (2006) compararam códigos CFD e integrais com base nos experimentos de dispersão da série Coyote; os autores concluem que o modelo CFD apresenta maior acurácia nos resultados quando comparados com os resultados obtidos com modelo integral relativo aos sensores localizados próximos à

fonte; ainda, o DEGADIS, superestima as concentrações nestas distâncias, enquanto que o SLAB apresenta resultados mais próximos dos obtidos via CFD.

Hanna et al. (2008) comparou seis dos modelos integrais mais utilizados na modelagem de gases densos, não considerando variações de terreno, concluindo que os seis modelos selecionados concordam nas estimativas de dispersão na direção do vento quando se fornece o mesmo termo fonte como entrada; Em Hanna et al. (2009) é incluído um modelo do tipo CFD, levando os autores a concluir que as previsões obtidas pelos códigos estão geralmente dentro da mesma faixa.

Sun et al. (2013) compararam os resultados obtidos com o código CFD FLUENT e o modelo integral DEGADIS contra os testes experimentais da série Burro 5 e 8, mostrando que especialmente em distâncias mais próximas da fonte as diferenças entre os resultados previstos pelos dois *softwares* são maiores.

2.4 AMÔNIA

A substância amônia possui um amplo emprego industrial em decorrência de suas propriedades químicas e físicas; assim, por exemplo, a amônia é usada industrialmente na fabricação de fertilizantes, de explosivos, na indústria têxtil, no tratamento de metais, inibição de corrosão, tratamento de águas e como fluido de trabalho em sistemas de refrigeração.

A Tabela 16 apresenta algumas propriedades físicas da amônia.

Tabela 16 - Propriedades da amônia.

Propriedade	Valor	Propriedade	Valor
Fórmula química	NH ₃	Densidade do Líquido [g/m ³]	607 a 20°C
Peso molecular [g/mol]	17,03	Pressão de vapor [kPa]	858,7 a 20°C
Ponto normal de ebulição [°C]	-33,4	Temperatura autoignição [°C]	650
Ponto de fusão [°C]	-77,7	Ponto de flash [°C]	-65
Gravidade específica [ar]	0,5971	NFPA F	1
Densidade do gás [kg/m ³]	0,610 a 20°C		

Fonte: Adaptado de Bubbico; Mazzarotta e Verdone (2014).

As misturas de amônia com ar são combustíveis; porém, a maior preocupação na manipulação e armazenamento de amônia é sua característica tóxica (GRIFFITHS; KAISER, 1982); assim, de acordo com RIVM (2009), como a amônia é considerada uma substância de baixa reatividade, ela deve ser modelada no escopo da análise de risco como sendo uma substância puramente tóxica.

Como o peso molecular da amônia é cerca de 17 g/mol (o do ar é cerca de 29 g/mol) e a densidade do vapor no ponto normal de ebulição (-33°C) é cerca de 0,9 kg/m³ (o do ar ambiente é 1,2 kg/m³ a 20°C), seria de se esperar que uma liberação acidental de amônia, nestas condições, se apresentasse na forma de uma nuvem passiva na atmosfera.

Entretanto, gases liquefeitos são liberados de tanques pressurizados tipicamente como uma nuvem gelada, contendo uma mistura bifásica de gás e gotículas líquidas (aerossol), o que confere maior densidade à nuvem (PANDYA; GABAS; MARSDEN, 2012; BUBBICO; MAZZAROTTA; VERDONE, 2014).

Nesse sentido, existe um conjunto de evidências descritas em relatórios de acidentes e de experimentos de campo (especialmente feitos no Deserto de Tortoise) com liberações a partir de tanques pressurizados que demonstram que, de fato, a amônia e o ar podem formar misturas mais densas do que o ar ambiente, conforme ilustrado na Figura 22 (BOUET; DUPLANTIER; SALVI, 2005; INERIS, 2005; HANNA; DRIVAS; CHANG, 1996; KAISER; WALKER, 1978; KAISER; PRICE; URDANETA, 1999; KUKKONEN et al., 1999; NUSSEY; MERCER; CLAY, 1990; NIELSEN, 1998).

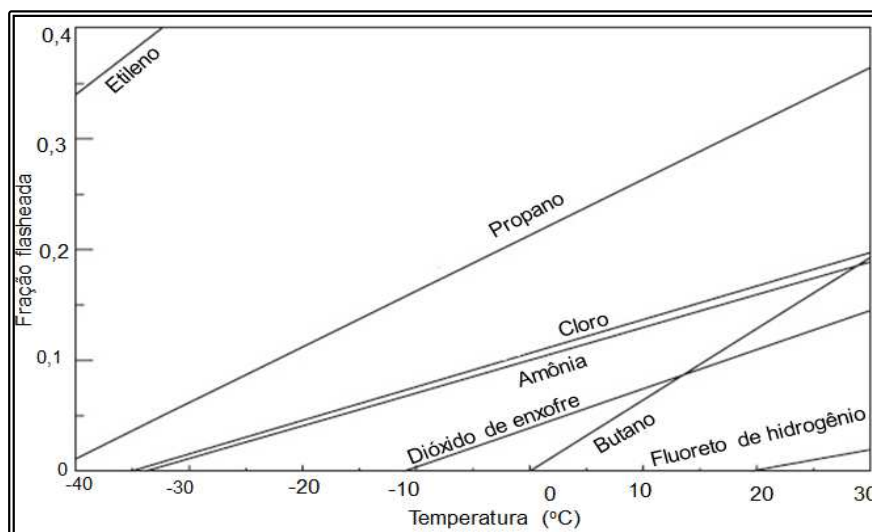
Figura 22 - Pluma típica de amônia.



Fonte: INERIS (2005).

Conforme os estudos de Bubbico e Mazzarotta (2008) e Pandya; Gabas e Marsden (2012), a amônia quando liberada na atmosfera, tem parte da vazão rapidamente evaporada (*flash*) formando uma nuvem de vapor, sendo esta quantidade função, entre outros fatores, da temperatura em que o produto está armazenado, conforme está ilustrado na Figura 23.

Figura 23 - Fração flasheada de amônia.



Fonte: Adaptado de Kukkonen (1999).

A outra fração da liberação poderá permanecer suspensa na nuvem de vapor como gotículas líquidas (aerossol) geradas por efeitos térmicos e mecânicos; esta quantidade depende das condições termodinâmicas iniciais, por exemplo, a temperatura de armazenamento, e de parâmetros mecânicos, como a velocidade de descarga através do furo em que se dá a liberação para a atmosfera.

Segundo Bubbico e Mazzarotta (2008) não existe uma equação única ou método comumente aceito para este cálculo, mas existem diferentes modelos na literatura; em um extremo, quando o valor da fração vaporizada instantaneamente (*flash*) for menor que 5%, não se forma aerossol, e a fração da liberação que formará uma poça de amônia será o complementar deste valor; no outro extremo, com fração vaporizada instantaneamente maior do que 25%, não haverá formação de poça e a quantidade de aerossol será o complementar deste valor.

Assim, quando a parte remanescente da vazão liberada de amônia cai sobre o solo formando uma poça líquida, esta passa a alimentar, então, a nuvem de amônia em decorrência de sua evaporação gradual; esta evaporação depende de

uma série de parâmetros (temperatura de ebulição do líquido, pressão de vapor, velocidade do vento, entre outras) e o vapor produzido por esta poça irá aumentar a massa de produto tóxico na nuvem em dispersão afetando a distância atingida pela nuvem.

Desta forma, conforme INERIS (2005) a modelagem da dispersão atmosférica de amônia deve considerar, minimamente, os seguintes aspectos:

- Efeitos gravitacionais devido à temperatura baixa da nuvem;
- A presença de aerossol na nuvem;
- Reações com a umidade do ar.

Existem vários trabalhos na literatura sobre a dispersão atmosférica de amônia, entre os quais, ressalta-se os mencionados nos parágrafos seguintes.

O trabalho de Kaiser e Walker (1978) que estudou a modelagem do processo de dispersão atmosférica de amônia liberada em tanques pressurizados.

O trabalho de Khan e Abbasi (2000) estudou a dispersão de amônia após liberações em tanque pressurizado em terreno plano para modificar o modelo de pluma unidimensional proposto por Ooms com novos parâmetros empíricos.

O trabalho desenvolvido pelo INERIS (2005) que estudou a dispersão de amônia com o *software* Phast em diversas condições de liberações horizontais.

Kisa e Jelemenský (2009) estudaram a dispersão de amônia via modelagem CFD com os testes do Riso National Laboratory (FLADIS) com jatos horizontais.

Pontiggia et al. (2010) estudaram a dispersão de amônia comparando os resultados da dispersão obtidos com o código de CFD e o código integral Phast em condições de baixa velocidade e estabilidade estável.

Pandya; Gabas e Marsden (2012) estudaram a dispersão de amônia fazendo um estudo de sensibilidade sobre os parâmetros que influenciam a modelagem de dispersão no *software* Phast.

Galeev; Salin e Ponikarov (2013) estudaram a dispersão de amônia utilizando modelagem CFD em superfície plana e com obstáculos concluindo, entre outras coisas, que a presença de obstáculo no percurso da nuvem proporciona uma redução na dose tóxica na linha de centro desta nuvem.

Sengupta et al. (2015) estudaram a dispersão de amônia utilizando o *software* ALOHA no escopo da análise quantitativa de risco.

3 METODOLOGIA

A metodologia usada nesta dissertação para avaliar a suscetibilidade da expressão de risco de uma instalação industrial às diferentes modelagens de dispersão atmosférica de gás denso será a aplicação destes modelos de dispersão por meio dos *softwares* de risco em que estão embutidos sobre dois cenários acidentais comumente estudados em análise de risco, e, posteriormente, fazer a estimativa da expressão de risco individual gerado na mesma (ZHOU; LIU, 2012).

Nesta esteira, o escopo desta seção é descrever na seção 3.1 os cenários acidentais adotados para comparar as diferentes modelagens de dispersão de gás denso e na seção 3.2 os *softwares* de risco que serão usados no estudo de caso.

3.1 CENÁRIOS COMPARATIVOS

Para os efeitos do estudo comparativo apresentado nesta dissertação será adotado um sistema que contenha um tanque de armazenamento cilíndrico e horizontal com 20.000 quilos de amônia pressurizada a 10 bar; as dimensões deste tanque são 6,5 metros de comprimento e 3 metros de diâmetro; a Figura 24 ilustra um sistema típico de armazenamento de amônia deste tipo.

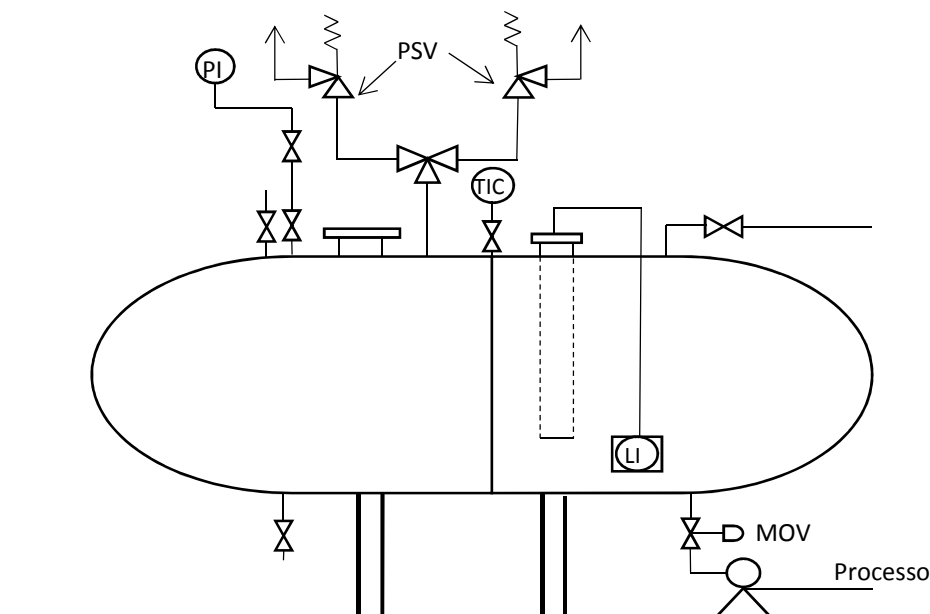
Figura 24 - Ilustração de tanque de amônia.



Fonte: Banco de dados CETESB.

A Figura 25 ilustra o sistema de instrumentação e controle comumente encontrado em um sistema de amônia nesta configuração.

Figura 25 - Instrumentação em tanque de amônia pressurizado.



PI: indicador de pressão; TIC: indicador e controlador de temperatura; LI: indicador de nível; MOV: válvula motorizada; PSV: válvula de segurança.

A amônia possui características especiais de dispersão que depende fortemente da forma em que a mesma é liberada na atmosfera; a liberação acidental considerada nesta dissertação segue o tipo mais frequentemente estudado de liberação acidental de amônia que é a liberação bifásica a partir da porção líquida de um tanque pressurizado; desta forma, o furo ou a fenda por onde ocorre a liberação acidental está localizado na parte inferior do tanque (INERIS, 2005).

São simulados dois cenários acidentais estabelecidos em Kaiser; Price, Urdaneta (1999), Bubbico e Mazzarotta (2008), RIVM (2009), Fabbri e Contini (2009) e Vilchez; Espejo e Casal (2011):

- Cenário acidental 1: liberação de todo o inventário do tanque de armazenamento de amônia em 10 minutos, o que corresponde a uma taxa de 33,3 kg/s;
- Cenário acidental 2: liberação por meio de um furo de 10 milímetros no tanque de armazenamento de amônia, correspondente a uma taxa de 1,8 kg/s por 10 minutos.

Conforme Melhem (2006), embora a altura e a largura da nuvem produzida em uma liberação acidental na atmosfera sejam parâmetros importantes na avaliação do desempenho de um modelo de dispersão atmosférica, os mesmos são de uso limitado no que tange à prática da determinação das zonas de perigo em análise quantitativa de risco, que é frequentemente baseada na distância atingida pelo limite de concentração adotado como referência (*endpoint*) na direção do vento (*downwind distance*), que será, desta forma, a saída principal de cada modelagem avaliada.

Para cada um dos cenários acidentais acima serão avaliadas as concentrações de amônia associadas aos níveis de fatalidade de 1% e 50% (CETESB, 2011).

As condições meteorológicas usadas estão sumarizadas na Tabela 17.

Tabela 17 - Condições meteorológicas para simulações.

Parâmetros de condição meteorológica	Valor
Temperatura ambiente [°C]	25
Velocidade do vento a 10 m de altura [m/s]	3,0
Categoria de estabilidade atmosférica (escala de Pasquill)	C
Umidade relativa do ar [%]	80
Temperatura do solo [°C]	30

Fonte: CETESB (2011).

Assume-se que a direção do vento é paralela ao eixo x com o objetivo de se estimar a máxima distância alcançada pela nuvem na dispersão atmosférica (SUN et al., 2013).

O valor do coeficiente de descarga é 0,62, típico para escoamentos de fluidos incompressíveis através de orifícios circulares (BRITTER et al., 2011).

Em relação ao comprimento de rugosidade na vizinhança da liberação, será adotado o valor de 0,30 metros, correspondente a um terreno plano, aberto, conforme indicado como padrão para análise de risco (RIVM, 2009).

Será considerado o tempo de 10 minutos para a exposição à dose tóxica.

As constantes a, b e n usadas na equação de probit da amônia estão apresentadas na Tabela 18, com concentração em ppm e tempo em minutos.

Tabela 18 - Constantes da equação de probit para a amônia.

Substância	a	b	n
Amônia	-16,21	1	2

Fonte: RIVM (2009).

A frequência associada aos cenários acidentais adotados nesta dissertação, ou seja, vazamento contínuo a partir de um furo com diâmetro efetivo de 10 milímetros é 1,0E-05/ano e para a liberação de todo o conteúdo do tanque de armazenamento em 10 minutos é 5,0E-07/ano (RIVM, 2009).

3.2 SOFTWARES

Os modelos de dispersão atmosférica usados nesta dissertação não serão obtidos diretamente a partir de seus desenvolvedores, e sim serão utilizadas suas versões executadas em *softwares* de risco comumente utilizados em análise quantitativa de risco.

Desta maneira os *softwares* usados nesta pesquisa são: o Effects, o ALOHA e o Phast; a seguir é feita uma breve descrição de cada um destes *softwares* de risco.

1) Effects

O *software* comercial Effects foi selecionado para o exercício comparativo em função de possuir o modelo SLAB, um dos modelos de dispersão mais usados em análise de risco para fazer as estimativas de dispersão de gases densos.

O *software* Effects contém uma série de modelos matemáticos para avaliação de consequências, sendo que, para cada modelo citado no Effects, é indicado o respectivo modelo no Yellow Book (BOOT, 2012; GARIAZZO; PELLICIONI; BRAGATTO, 2012), que permite a modelagem e a avaliação quantitativa de taxas de liberação (de vasos ou linhas, líquidos e gases liquefeitos pressurizados – vapor, líquido, bifásicas e liberações com *spray*), evaporação de

poça (em água ou terra), dispersão atmosférica (de nuvens neutras, nuvens pesadas e jatos livres turbulentos), explosão de nuvem de vapor e radiação térmica de incêndio (TNO, 2003).

O Effects dispõe cada modelo citado acima separadamente, porém, uma característica única deste *software* é a possibilidade de fazer a modelagem conectando-se estes modelos e transferindo a saída de um modelo diretamente para a entrada do modelo seguinte dentro de um cenário acidental completo.

Para liberação de gás liquefeito sobre pressão o Effects usa o modelo de fluxo bifásico TPDIS desenvolvido pelo Instituto Meteorológico de Finnish, descrito em CPR14E (2005), válido apenas para um limitado número de substâncias, entre elas a amônia, e que assume o Modelo Homogêneo de Equilíbrio.

Na modelagem da dispersão atmosférica, o Effects utiliza o esquema de estabilidade proposto por Pasquill-Guifford.

Os modelos de dispersão no Effects são aplicáveis somente em terreno aberto, entretanto, o usuário pode entrar com diferentes comprimentos de rugosidade, que permite avaliar a influência de árvores ou edificações, por exemplo, no trajeto da dispersão.

O modelo assume a direção horizontal de liberação e na direção do vento.

O *software* não permite a escolha de perfil de velocidade vertical do vento.

A versão usada neste estudo é a 5.5 disponível na CETESB.

2) ALOHA

O ALOHA é um *software* desenvolvido e disponibilizado gratuitamente pela Divisão de Resposta à Emergência (*Emergency Response Division – ERD*), uma divisão dentro da Administração Atmosférica e Oceânica Nacional (NOAA - *National Oceanic and Atmospheric Administration*) em colaboração com a Agência de Proteção Ambiental (EPA - *Environmental Protection Agency*) dos Estados Unidos.

O ALOHA possui dois modelos de dispersão atmosférica embutidos no *software*: o ALOHA/DEGADIS para modelagem atmosférica de gases pesados e o modelo de pluma gaussiana (MPG) para substâncias com dispersão passiva ou neutra; o *software* possui um algoritmo de decisão interno baseado no número de Richardson, para selecionar o modelo mais adequado com base nos dados de entrada do usuário; por outro lado, o *software* permite que o usuário imponha um determinado modelo de dispersão independente do R_{i0} da liberação acidental.

O *software* possui quatro classes gerais de termo fonte: a opção “direta”, onde o usuário especifica a quantidade de material que entra diretamente na atmosfera, sendo a única opção para liberação elevada; a opção “poça”, que modela a evaporação de uma substância a partir de uma poça de área constante; a opção “tanque”, que modela a liberação a partir de um furo na parede de um tanque cilíndrico ou esférico sobre o solo com substância única, ou ainda em uma linha curta ou em uma válvula contendo líquido ou gás pressurizado ou ainda um gás liquefeito sobre pressão e, por último, a opção “duto de gás”, que modela liberação em duto conectado ou não a tanque de armazenamento (JONES et al. 2013).

O código limita a duração do termo fonte entre 1 minuto (denominada liberação instantânea) e 1 hora.

Segundo Jones et al. (2013) a escala típica para as estimativas de zonas de perigo geradas no *software* estão entre 100 e 10^6 metros.

O *software* tem capacidade limitada para tratar efeitos associados às construções e terrenos no caminho da dispersão e não deve ser usado para modelagens de dispersão em velocidades de vento muito baixas ou em condições de calmaria (1m/s a 10 metros de altura).

Os resultados produzidos no *software* ALOHA são apresentados no que é chamado no código de zonas de perigo (*threat zones*), sempre desenhadas com a direção do vento para a direita, porém, o mesmo deixa claro que esta direção não necessariamente corresponde à direção cardinal do vento.

As concentrações calculadas no ALOHA são sempre ao nível do solo.

Para os cenários de dispersão atmosférica (zonas de perigo, área de flamabilidade e de explosões de nuvens de vapor) a linha externa nas figuras à zona de perigo propriamente dita representa a incerteza na direção do vento; o modelo considera que o vento raramente sopra constantemente em qualquer uma das possíveis direções e esta delimitação representaria em torno de 95% do tempo dentro do qual se espera que a nuvem permaneça; quanto menor a velocidade do vento, mais este vento deve experimentar alterações em sua direção e, portanto, maior será a delimitação do intervalo de confiança.

O código usa o Modelo de Equilíbrio Não Homogêneo para cenários que envolvem a liberação de líquido superaquecido ou bifásico que resulta de processo de vaporização instantânea (*flash*).

O *software* não permite a escolha de perfil de velocidade vertical do vento.

A versão usada neste estudo é a 5.4.4.

3) Phast

O Phast (Process Hazard Analysis Software Tool) é um *software* comercial desenvolvido pela DNV Software para modelagem de consequências de vazamentos acidentais de substâncias tóxicas ou inflamáveis na atmosfera (DNV, 2005; HANNA et al., 2008; PANDYA; GABAS; MARSDEN, 2012).

Segundo Witlox et al. (2013), o Phast permite a avaliação de consequências decorrentes de uma série de hipóteses acidentais presentes em indústrias de processos como bola de fogo (*fireball*) em liberações instantâneas, jato de fogo em liberações de fluidos pressurizados, incêndio em poças (incluindo o *rainout*) e incêndio e explosão em nuvens quando se trata de substâncias inflamáveis.

O pacote inclui métodos para o cálculo da descarga e dispersão envolvendo efeitos de materiais tóxicos e inflamáveis. Neste sentido, este trabalho adota a opção *tank head* para o cálculo da taxa de vazamento de produto.

O componente principal do Phast é o modelo de dispersão Unified Dispersion Model (UDM) que incorpora submodelos para jatos bifásicos, dispersão atmosférica passiva e densa, *rainout*, e espalhamento e evaporação de poças.

Quanto ao perfil vertical de velocidade de vento, o *software* permite que o usuário opte entre o perfil constante, que usa a mesma velocidade em todas as alturas, e o perfil de lei de potência, onde a velocidade do vento varia em função da altura, que é a opção recomendada e adotada neste estudo comparativo (PATRA, 2006). Ainda, o *software* trabalha com um parâmetro chamado “*cut off height*”, para evitar o uso de velocidade de vento igual a zero ao nível do solo.

Segundo Witlox et al. (2013), o *software* é validado contra os experimentos de Prairie Grass, Deserto de Tortoise e FLADIS (jato de amônia contínuo elevado bifásico), EEC (jato de propano contínuo elevado bifásico), Goldfish (jato de fluoreto de hidrogênio contínuo elevado), Maplin Sands, Burro e Coyote, Thorney Island e Kit Fox (dispersão de dióxido de carbono em liberação contínua e de duração finita).

A versão do Phast utilizada neste estudo é a 6.7 disponível no LabRisco – Laboratório de Análise, Avaliação e Gerenciamento de Risco da USP.

4 RESULTADOS OBTIDOS

A seguir estão apresentados os contornos de isoconcentração gerados nos softwares Phast, Effects e ALOHA para os cenários acidentais descritos em 3.1.

4.1 LIBERAÇÃO DE TODO INVENTÁRIO EM 10 MINUTOS

O modelo UDM do Phast produz os contornos apresentados na Figura 26 e na Figura 27 para as probabilidades de morte de 1% e 50% respectivamente:

Figura 26 - Phast/UDM, Cenário 1, 3979 ppm de amônia.

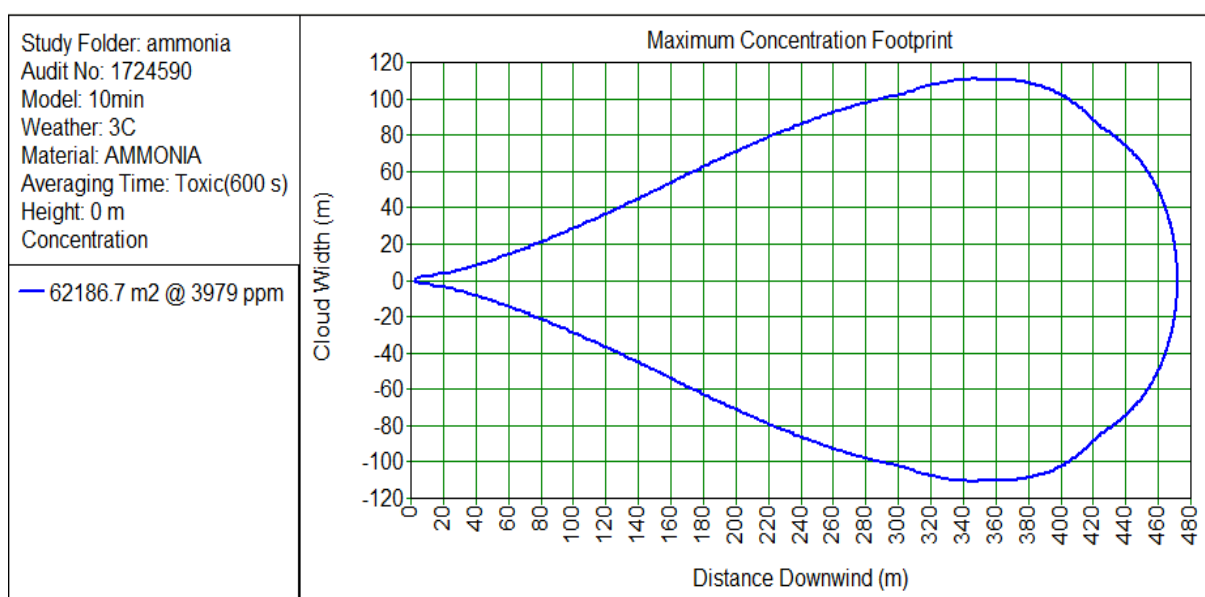
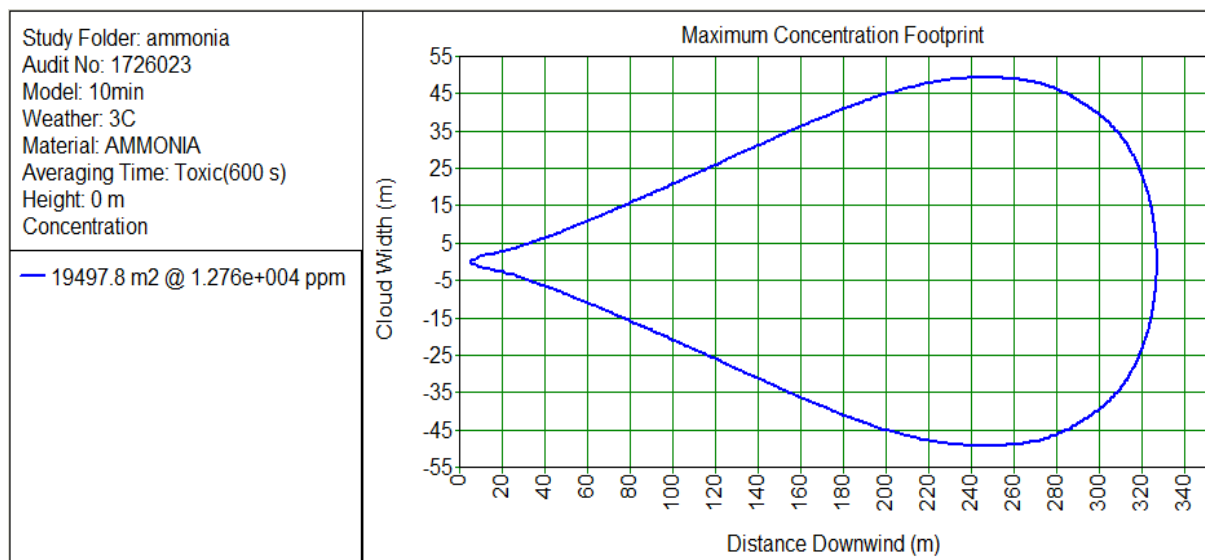


Figura 27 - Phast/UDM, Cenário 1, 12755 ppm de amônia.



Os contornos gerados com o SLAB no Effects para as probabilidades de morte de 1% e 50% estão apresentados na Figura 28 e Figura 29 respectivamente:

Figura 28 - Effects/SLAB, Cenário 1, 3979 ppm de amônia.

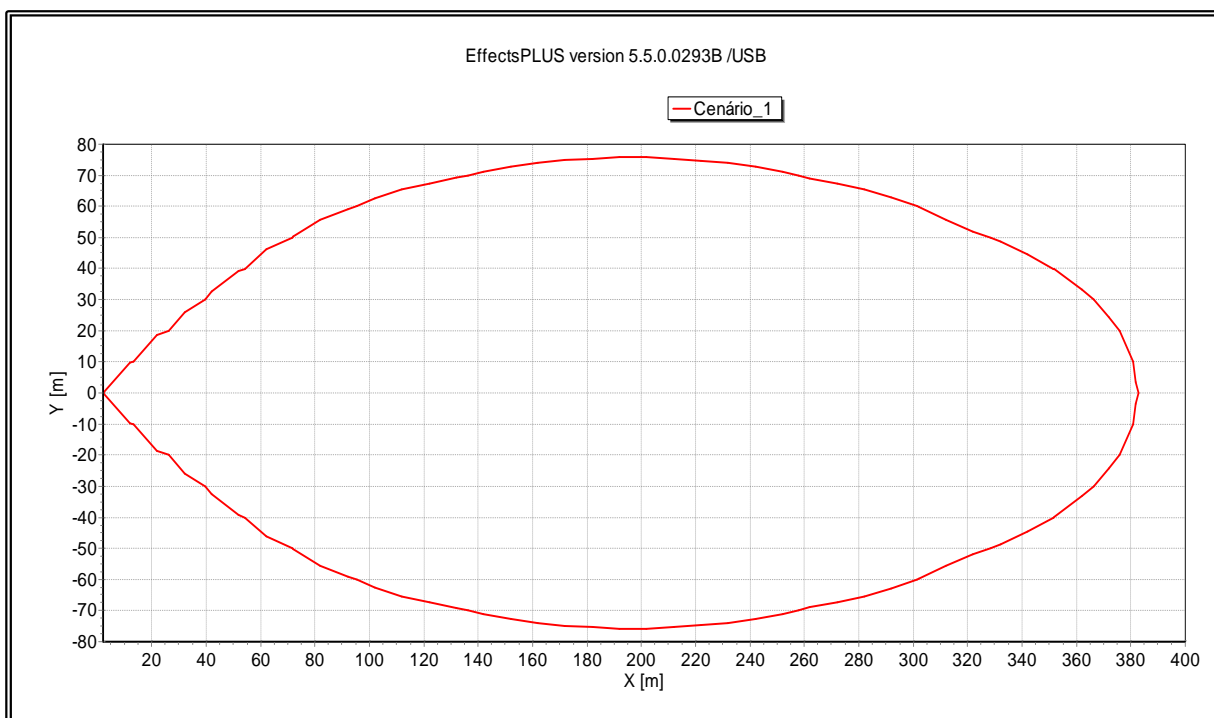
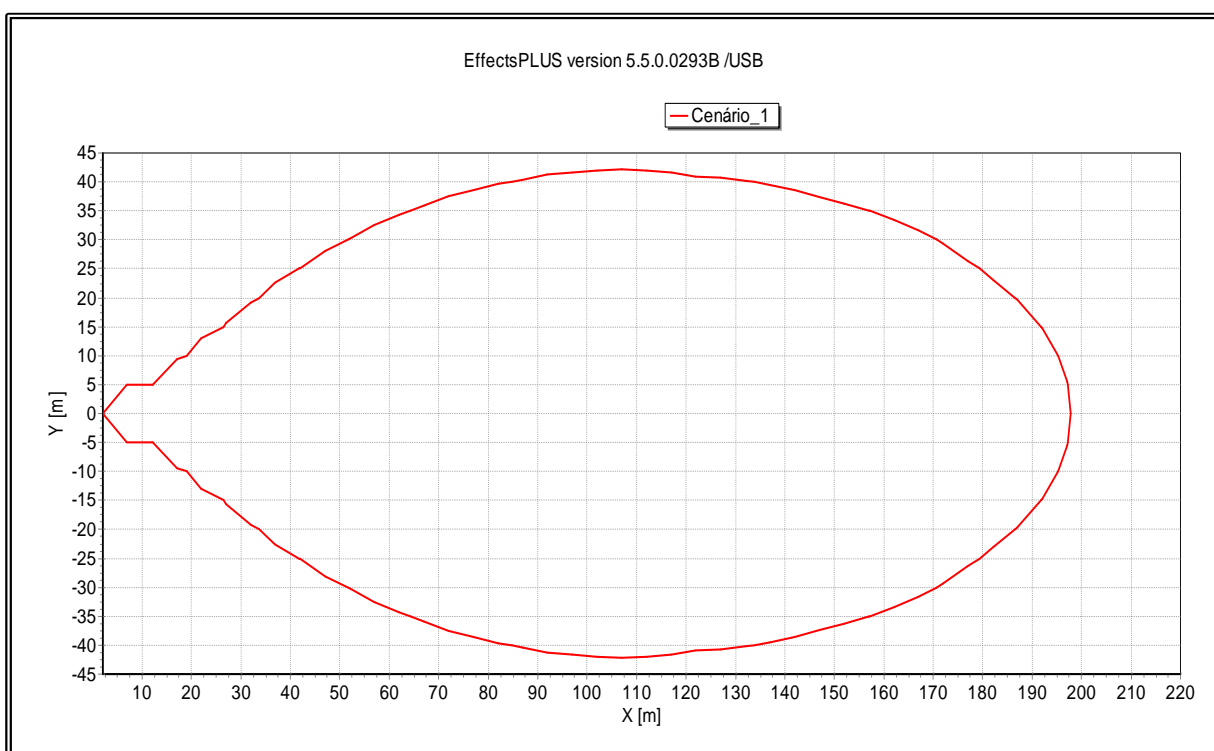


Figura 29 - Effects/SLAB, Cenário 1, 12755 ppm de amônia.



Os contornos gerados com o ALOHA/DEGADIS para as probabilidades de morte de 1% e 50% estão apresentados na Figura 30 e na Figura 31 respectivamente:

Figura 30 – ALOHA/DEGADIS, Cenário 1, 3979 ppm de amônia.

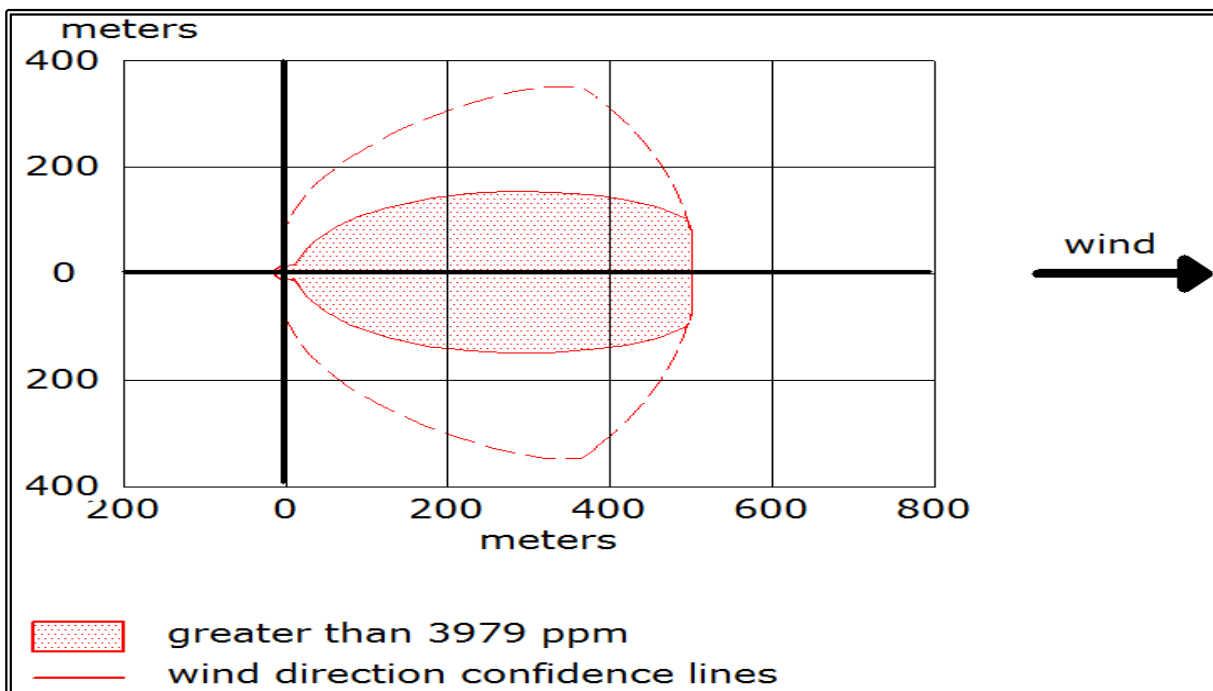
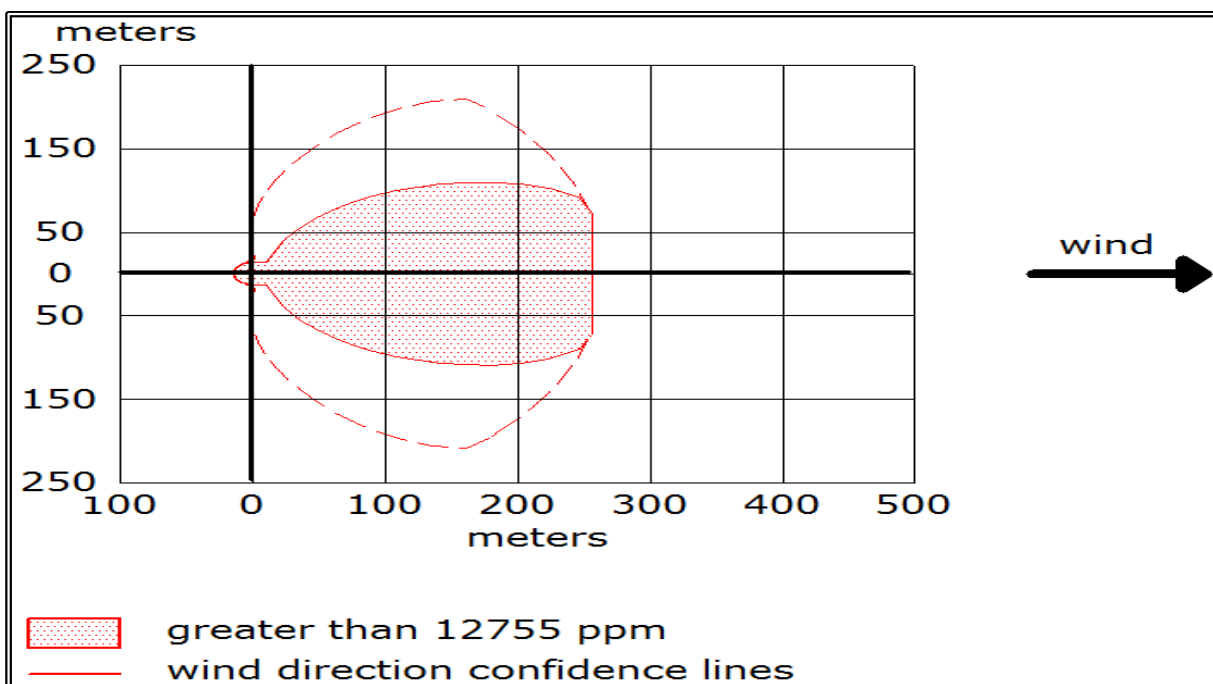


Figura 31 – ALOHA/DEGADIS, Cenário 1, 12755 ppm de amônia.



Os contornos gerados com o MPG no ALOHA para as probabilidades de morte de 1% e 50% estão apresentados na Figura 32 e Figura 33 respectivamente:

Figura 32 – ALOHA/MPG, Cenário 1, 3979 ppm de amônia.

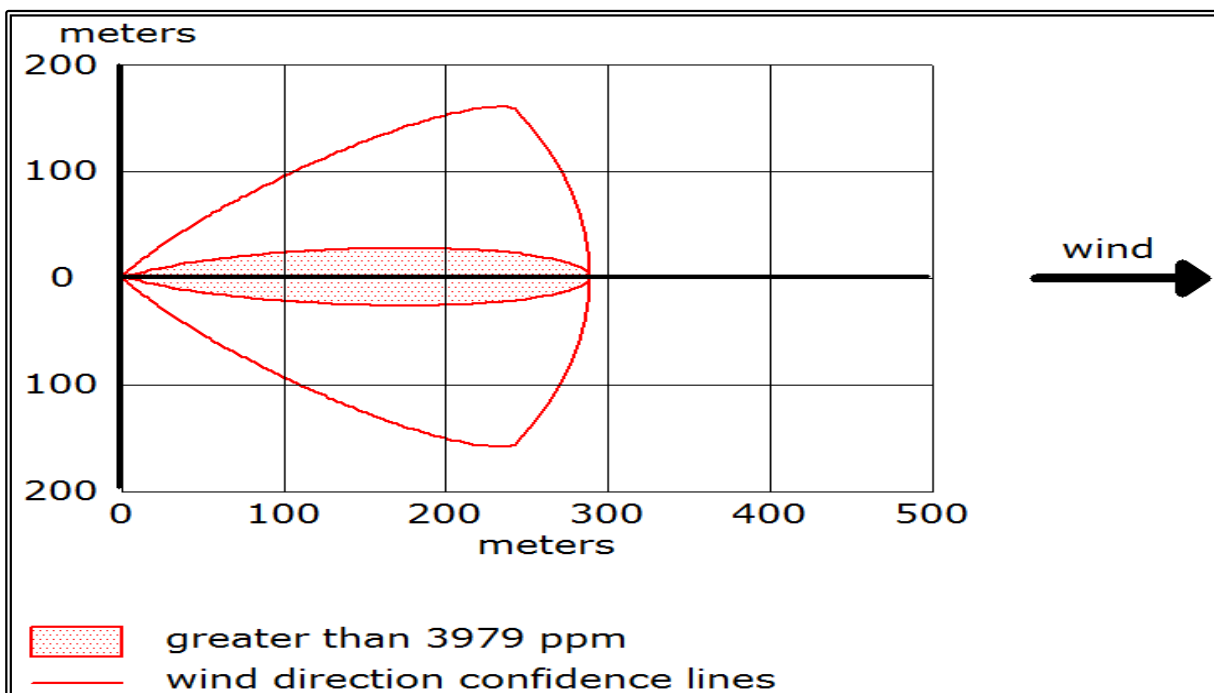
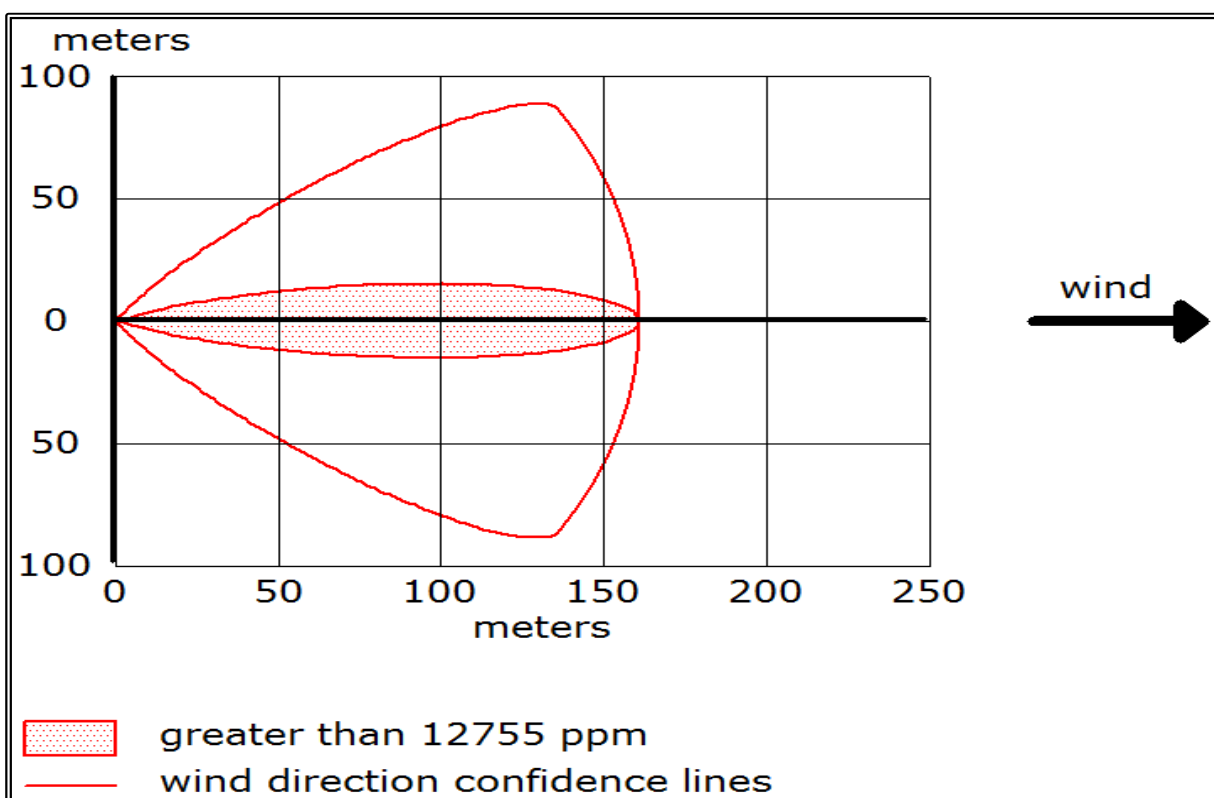


Figura 33 – ALOHA/MPG, Cenário 1, 12755 ppm de amônia.

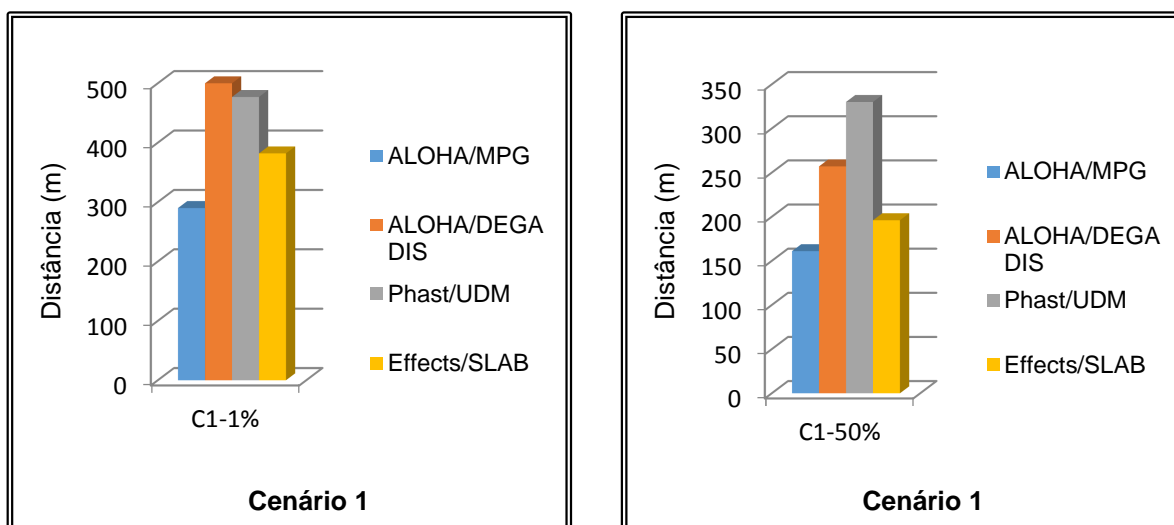


Os resultados apresentados acima para o cenário 1 estão sumarizados na Tabela 19 e na Figura 34.

Tabela 19 - Sumário dos resultados para o cenário 1.

Distâncias no Cenário 1 (m)				
	1%	Desvio da média (%)	50%	Desvio da média (%)
ALOHA/MPG	290	-	161	-
ALOHA/DEGADIS	500	10	257	-2
Phast/UDM	477	5	330	26
Effects/SLAB	382	-16	196	-25
Valor médio	453		261	

Figura 34 - Distâncias alcançadas no cenário 1.



4.2 LIBERAÇÃO A PARTIR DE FURO DE 10 MILÍMETROS NO FUNDO DO RESERVATÓRIO

O modelo UDM do Phast produz os contornos apresentados na Figura 35 e Figura 36 para as probabilidades de morte de 1% e 50% respectivamente:

Figura 35 - Phast/UDM, Cenário 2, 3979 ppm de amônia.

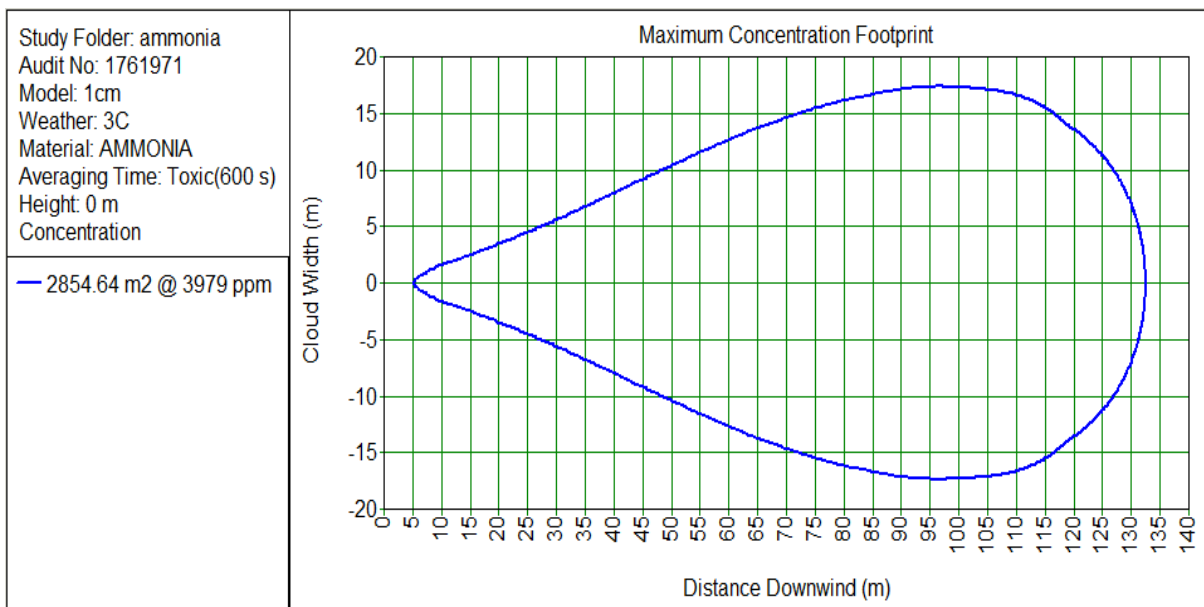
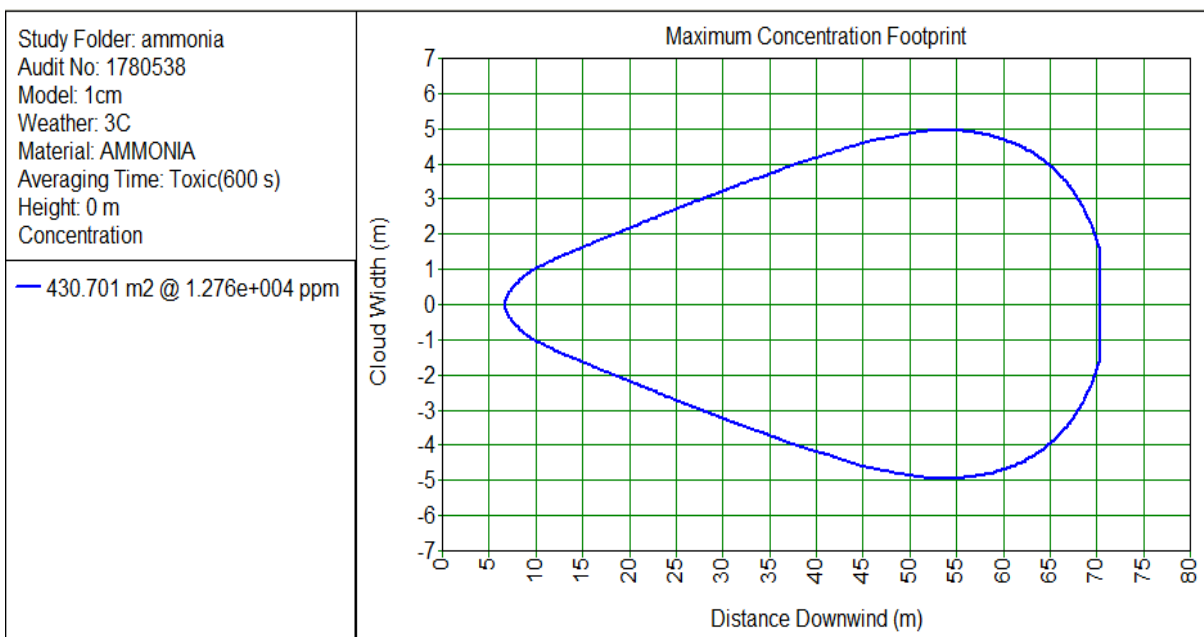


Figura 36 - Phast/UDM, Cenário 2, 12755 ppm de amônia.



Os contornos gerados com o SLAB no Effects para as probabilidades de morte de 1% e 50% estão apresentados na Figura 37 e Figura 38 respectivamente:

Figura 37 - Effects/SLAB, Cenário 2, 3979 ppm de amônia.

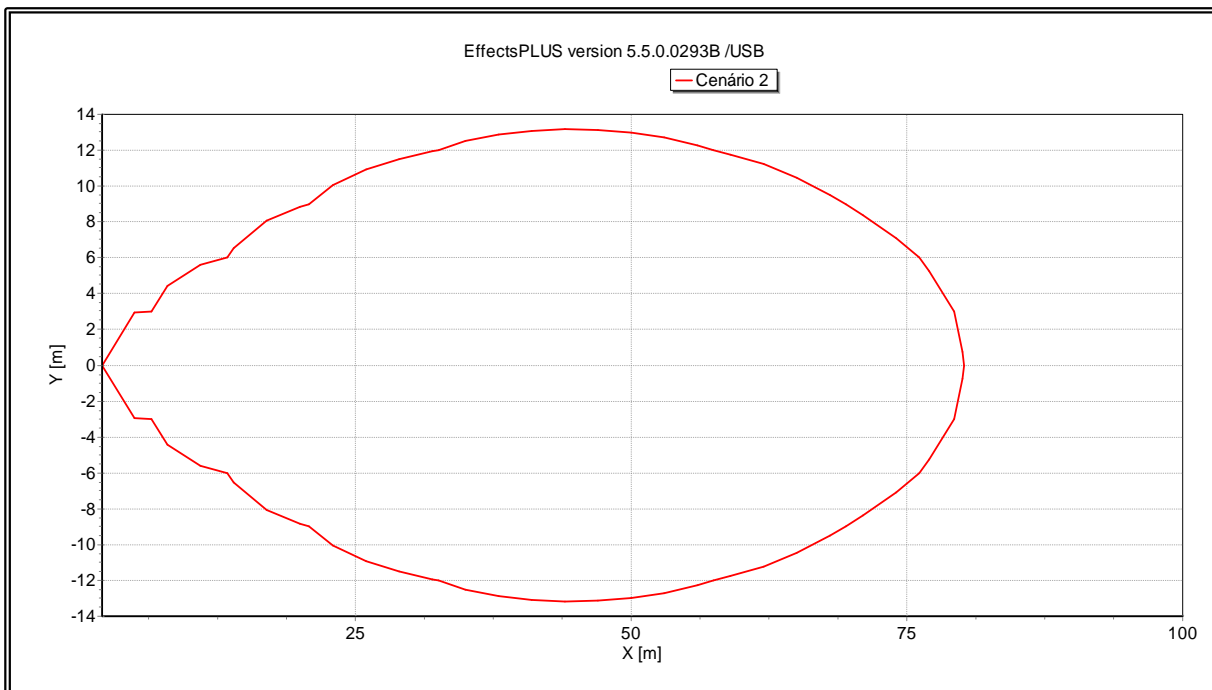
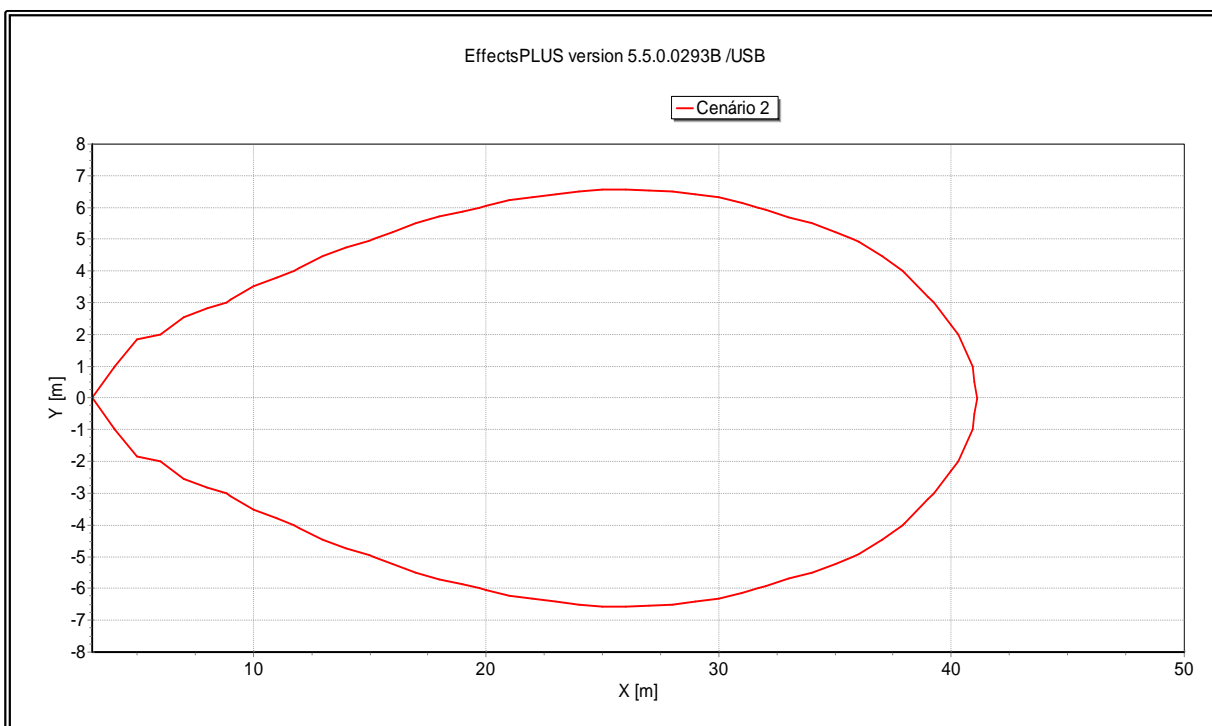


Figura 38 - Effects/SLAB, Cenário 2, 12755 ppm de amônia.



Os contornos gerados com o ALOHA/DEGADIS para as probabilidades de morte de 1% e 50% estão apresentados nas Figura 39 e Figura 40 respectivamente:

Figura 39 – ALOHA/DEGADIS, Cenário 2, 3979 ppm de amônia.

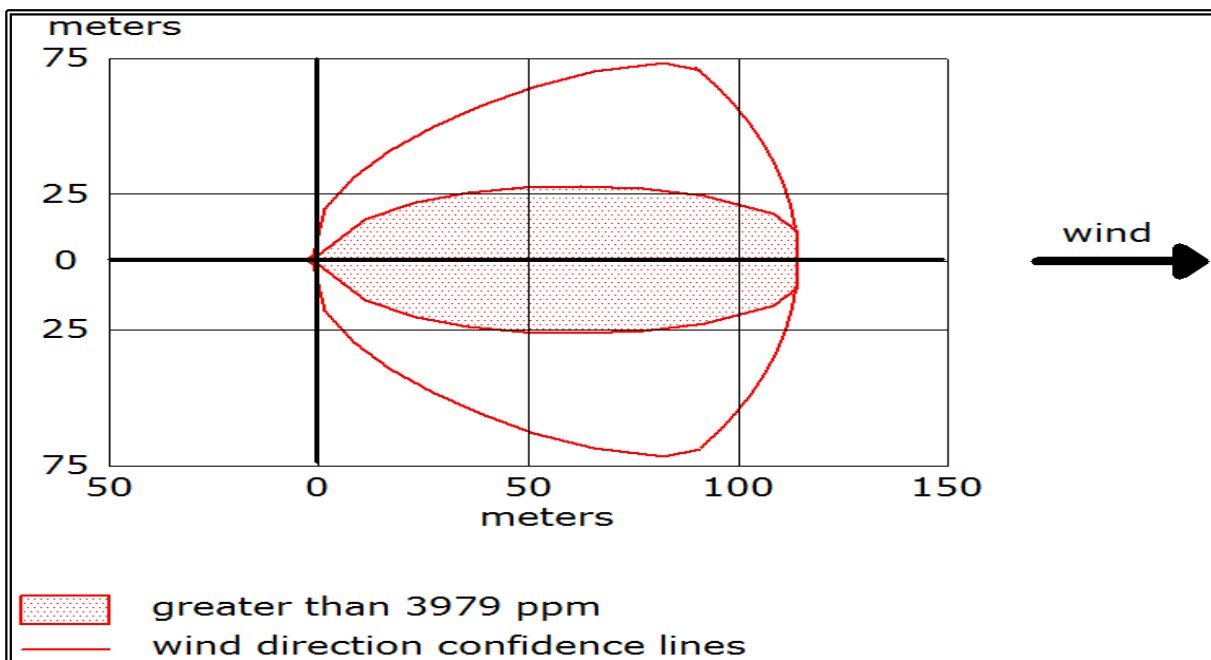
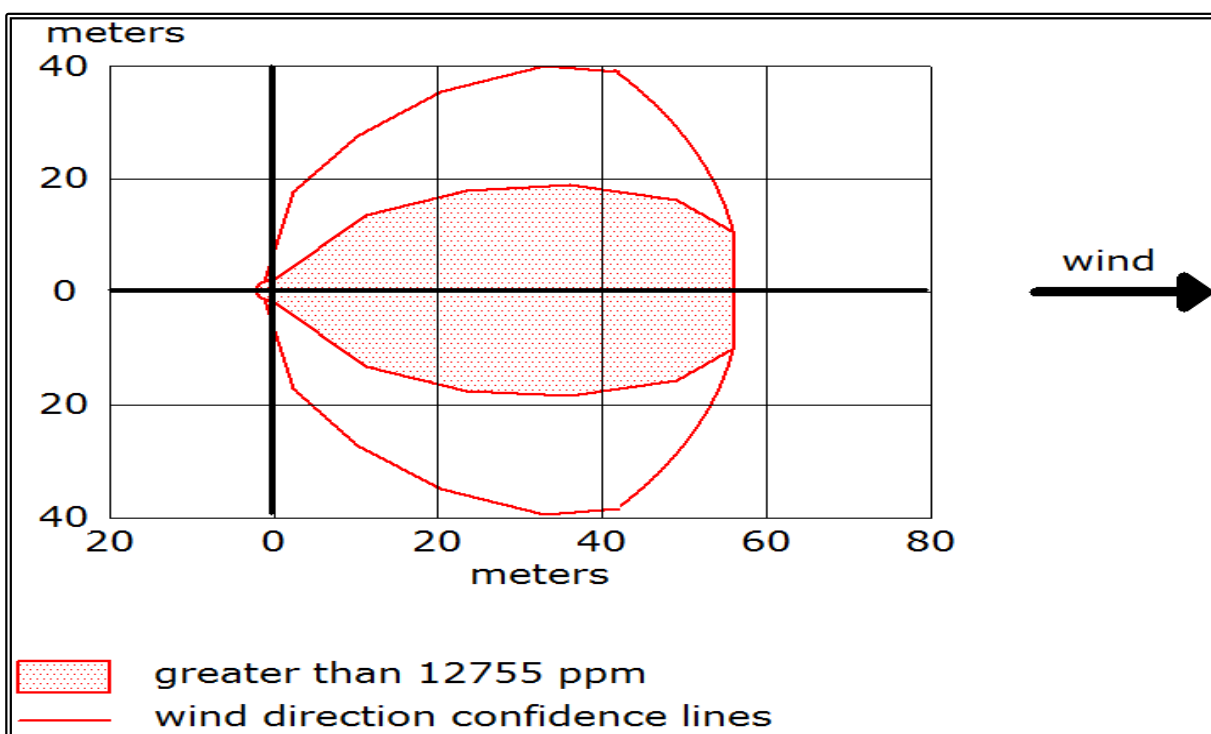
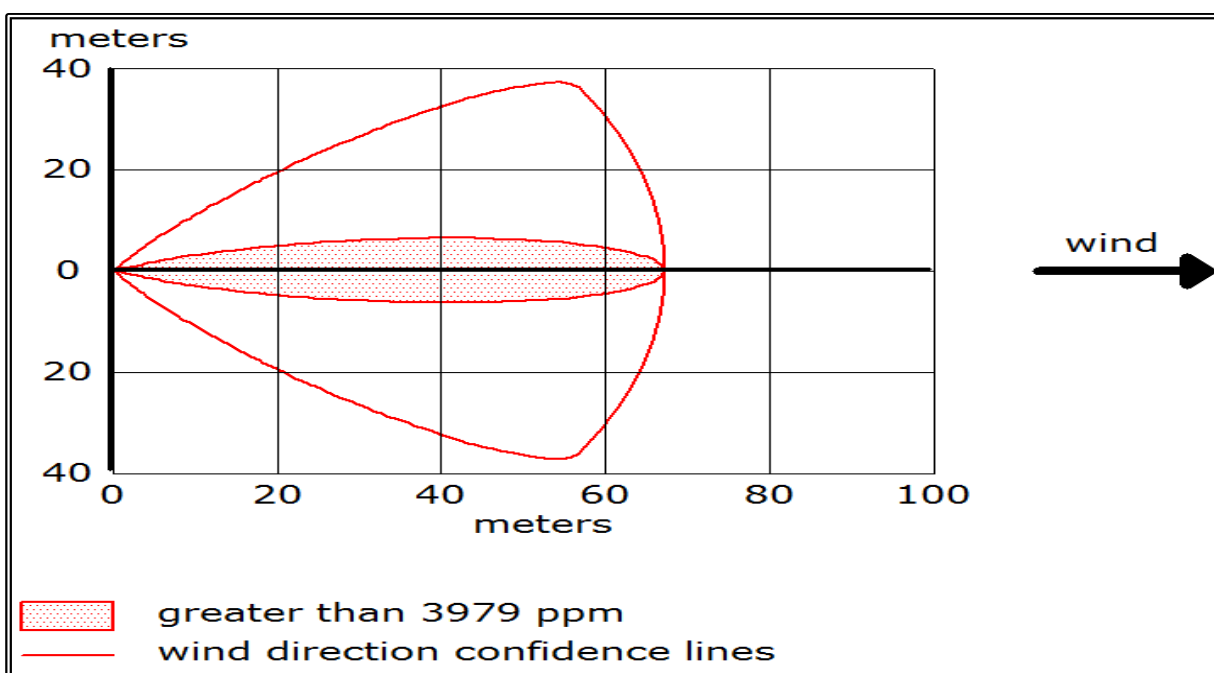


Figura 40 – ALOHA/DEGADIS, Cenário 2, 12755 ppm de amônia.



A isopleta gerada com o MPG no ALOHA para a probabilidade de morte de 1% está apresentada nas Figura 41; o MPG do ALOHA não gera gráfico para a concentração de 12755 ppm; o *software* informa a distância alcançada de 38 metros e observa que a “*Threat zone*” para esta situação não é desenhada porque as previsões da dispersão são menos confiáveis nas proximidades da fonte de lançamento.

Figura 41 - ALOHA/MPG, Cenário 2, 3979 ppm de amônia.

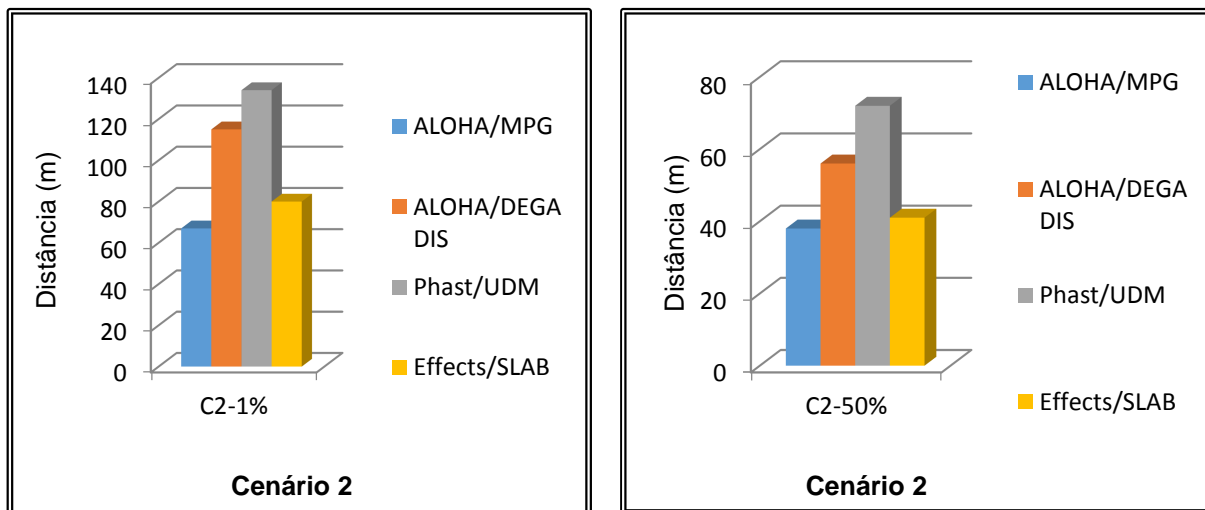


Os resultados apresentados acima para o cenário 2 estão sumarizados na Tabela 20 e na Figura 42.

Tabela 20 - Sumário dos resultados para o cenário 2.

	Distâncias no Cenário 2 (m)			
	1%	Desvio da média (%)	50%	Desvio da média (%)
ALOHA/MPG	67	-	38	-
ALOHA/DEGADIS	115	5	56	0
Phast/UDM	134	22	72	29
Effects/SLAB	80	-27	41	-27
Valor médio	110		56	

Figura 42 - Distâncias alcançadas no cenário 2.



4.3 SÍNTESE E ANÁLISE DOS RESULTADOS DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA DE AMÔNIA

Como pode ser visto nas figuras acima, os contornos de isoconcentração obtidos nos três diferentes *softwares* (ALOHA, Effects e Phast), ou quatro modelos de dispersão atmosférica (DEGADIS e o modelo de pluma gaussiana (MPG), SLAB e UDM respectivamente) atingiram maiores distâncias na direção do vento nas condições estabelecidas no cenário 1 em relação às distâncias atingidas nas condições estabelecidas no cenário 2.

Esta diferença está atrelada ao fato de que o cenário 1 proporciona uma condição de liberação mais severa do que o cenário 2, o que pode ser evidenciado pela maior taxa de liberação mássica: 33,3 kg/s por 10 minutos no cenário 1 contra 1,8 kg/s por 10 minutos no cenário 2, e ao qual está associado um maior conteúdo de gás denso, considerando o critério do número de Richardson.

Essa maior característica de gás denso do cenário 1 é ratificada, ainda, com auxílio do *software* Phast, que permite identificar o ponto em que ocorre a transição de nuvem densa para nuvem passiva: enquanto no cenário 1 a transição de regime de dispersão de gás pesado para dispersão passiva ocorre a 355 metros do ponto de liberação, no cenário 2 esta transição ocorre já a 120 metros do ponto de liberação.

Observa-se nas isopleias apresentadas e nas respectivas distâncias máximas atingidas para os dois níveis de interesse estudados em cada um dos dois

cenários acidentais, ou seja 1% e 50% de probabilidade de fatalidade, que o modelo de pluma gaussiana (MPG) foi o que atingiu as menores distâncias ao longo da direção do vento e as menores larguras de plumas, o que ratifica os comportamentos distintos do processo de dispersão atmosférica de nuvens densas e de nuvens passivas: a entrada de ar em uma nuvem passiva é maior do que a entrada de ar em nuvem densa, intensificando, desta forma, a diluição do contaminante liberado acidentalmente.

Observa-se, contudo, que as diferenças produzidas entre o MPG e os modelos de nuvens densas foram menores no cenário 2, caracteristicamente mais suave do que o cenário 1.

Outra observação em relação às diferenças produzidas está relacionada aos níveis de concentração estudados: observa-se que os desvios médios nas distâncias alcançadas pelas nuvens foram maiores na maior concentração de amônia, ou seja, 12755 ppm, no cenário mais intenso, ou seja, com maior número de Richardson ou um maior grau de nuvem densa; por outro lado, para o cenário 2, mais suave no que diz respeito ao caráter denso da nuvem, os desvios foram bastante parecidos, o que dá indícios de resultados diferentes na modelagem da dispersão de nuvem densa, que domina a dispersão nas proximidades do ponto de liberação; por exemplo, no cenário 1, o desvio médio da distância fornecida no *software* Phast para 3979 ppm é de 5%, enquanto que, o desvio médio neste mesmo cenário para a concentração de 12755 ppm é de 26%; por outro lado no cenário 2, o desvio médio é de 22% no cenário 1 e 29% no cenário 2, ou seja, desvios mais próximos.

Por outro lado, a maior aproximação nas previsões das modelagens de uma forma global no final da dispersão, ou seja, considerando as previsões da modelagem inicial de gás denso e das previsões da modelagem da nuvem quando sua densidade está próxima da atmosfera, dá indícios também de divergências nos modelos de dispersão passiva ou até mesmo na forma com que cada modelo faz a transição de modelo de nuvem densa para o regime de dispersão passiva.

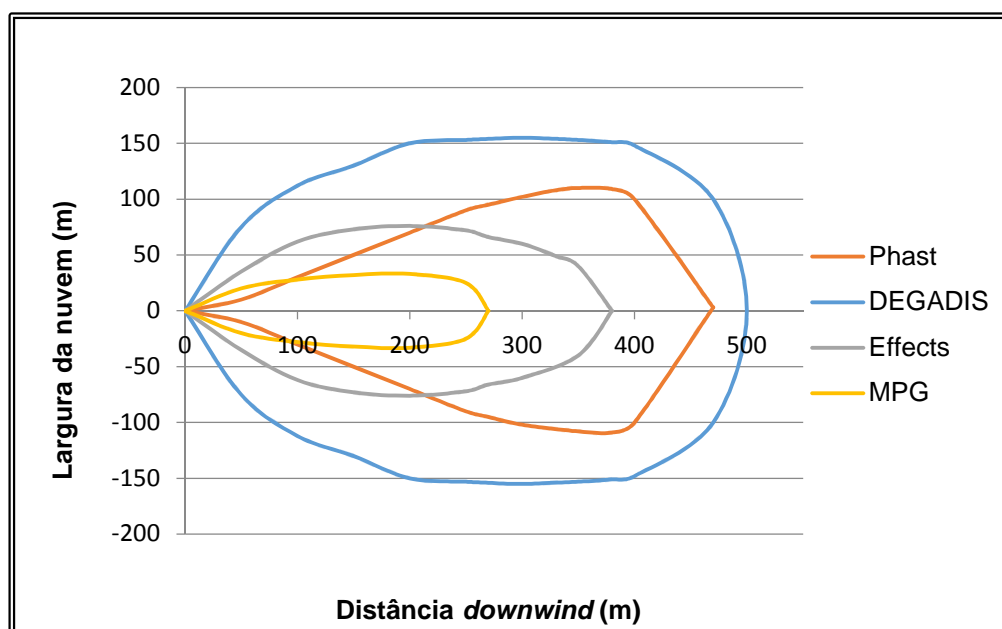
Vale frisar que a forma em que ocorre esta transição pode ser variada no modelo UDM/Phast, que adota o valor *default* de 0,0015 para a diferença de densidade da pluma e do ar ambiente para fazer a transição entre os regimes, entretanto, os demais *softwares* estudados não permitem esta possibilidade, além de não indicarem a forma exata o ponto em que esta transição é feita.

As diferenças nas distâncias atingidas foram maiores entre os modelos UDM executado no Phast e o modelo SLAB, executado no *software* Effects; uma possível explicação para esta observação é a semelhança entre os modelos UDM e o ALOHA/DEGADIS e a diferente abordagem matemática empregada no modelo SLAB, que utiliza o equacionamento oriundo da teoria de águas rasas.

Entretanto, não obstante as diferenças observadas, é válido salientar que as mesmas se encontram dentro das faixas encontradas por outros autores em estudos comparativos de modelos de dispersão atmosférica de nuvens densas já mencionadas anteriormente neste texto (HANNA et al., 2008).

Por último, não obstante, de acordo com Melhem (2006), no escopo de análise de risco o parâmetro mais frequentemente usado para o estabelecimento de zonas de perigo seja a distância atingida pela nuvem na direção do vento, é válido observar as diferenças nas formas das nuvens tóxicas geradas nas quatro modelagens avaliadas, conforme está apresentado na Figura 43, o que ressalta as diferenças produzidas nas mesmas.

Figura 43 - Áreas geradas nas diferentes modelagens.

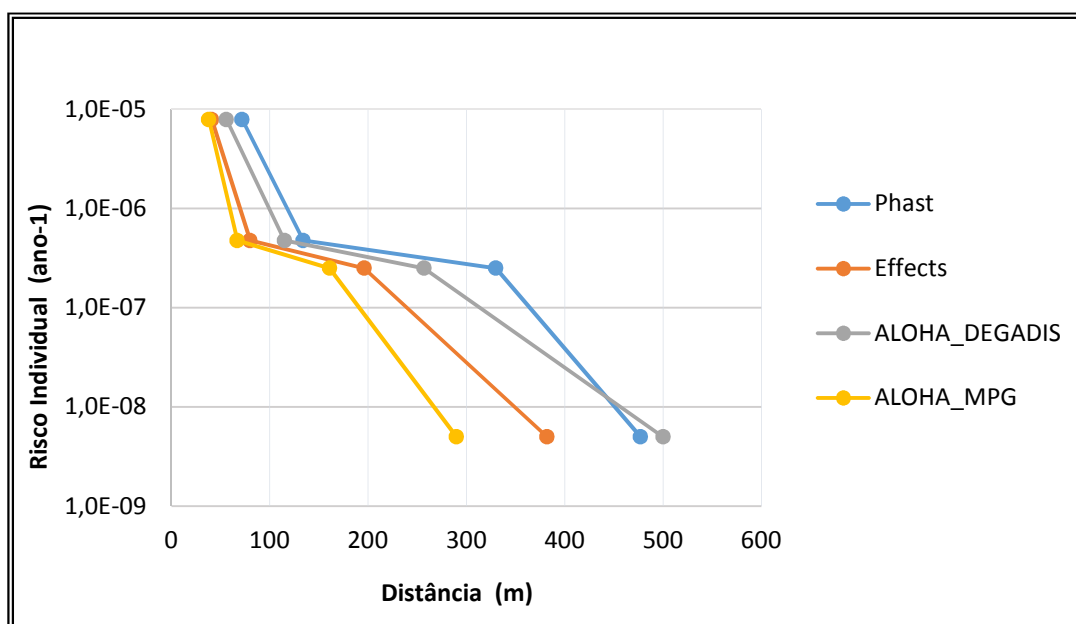


4.4 RISCO INDIVIDUAL PARA INSTALAÇÃO DE AMÔNIA

Desta forma, obtidas as distâncias alcançadas pelas nuvens para as probabilidades de fatalidades de 1% e 50% para os cenários 1 e 2 e de posse das frequências de ocorrência destes cenários, foi feito o cálculo do risco individual

gerado pela instalação de amônia estudada, com base na eq. (2), em função da distância na direção do vento a partir do ponto de liberação, conforme está apresentado na Figura 44, para cada um dos *softwares* de risco e suas respectivas modelagens de dispersão atmosférica.

Figura 44 - Evolução do risco individual nos *softwares* estudados.



Nesta figura, pode ser observado que o risco individual é maior quanto mais próximo da fonte de liberação está o ponto considerado em todos os *softwares* de risco; ainda, pode se observar que as maiores diferenças nos níveis de risco produzidos pelos *softwares* avaliados ao longo da distância estão associadas às menores frequências e às maiores distâncias a partir da fonte da liberação, o que mostra que as decisões finais com base em risco tecnológico podem ser diferentes em função da modelagem de dispersão adotada para a execução do estudo, ou seja, o próprio *software* de risco, tendo em vista que os demais pressupostos para o cálculo deste risco foram mantidos mais uniformes quanto possível (mesmo termo fonte e mesmas condições de meteorologia e topografia).

Este resultado é ratificado, ainda, quando a dispersão atmosférica é simulada na rugosidade de superfície de 3 centímetros por meio de curvas de isorrisco (SALAZAR; MARTINS, 2015).

5 CONCLUSÕES

Em decorrência da complexidade inerente ao próprio fenômeno de dispersão atmosférica de gás denso existem vários modelos que podem ser usados na estimativa do alcance da nuvem formada em eventos de liberações acidentais em plantas de processo, variando desde modelos mais simples que utilizam correlações empíricas ou fenomenológicas até os mais complexos, que utilizam a resolução da equação de Navier-Stokes para representar o fluxo tridimensionalmente, passando pelos chamados modelos operacionais, os modelos integrais ou de similaridade.

Estes modelos integrais, embora comprometam a inclusão de aspectos relacionados às complexidades de terreno na avaliação do processo de dispersão, não obstante existam algoritmos para contornar esta dificuldade para situações mais simples, permitem a simulação de um grande número de cenários em curto intervalo de tempo, o que os torna bastante atraentes para análise de risco, tendo em vista a grande quantidade de cenários que devem ser estudados neste tipo de análise.

A comparação da modelagem de dispersão de gases densos apresentada neste texto é feita como aplicação de *softwares* comumente usados em análise de risco e que contenham algoritmos específicos para dispersão de gás denso (o Effects, que contém o modelo SLAB, o Phast, que contém o modelo UDM e o ALOHA, que contém uma forma do DEGADIS, chamado pelos seus desenvolvedores de ALOHA/DEGADIS), sendo, para isso, uniformizados tanto quanto possível as entradas destes modelos (os modelos de termo fonte e as condições meteorológicas e topográficas) sobre dois cenários típicos que devem compor um estudo de análise de risco: o vazamento de todo inventário de um tanque de armazenamento em 10 minutos e o vazamento neste tanque a partir de um furo de 10 milímetros localizado em sua parte inferior.

Além disso, foi incluído no estudo o modelo de pluma Gaussiana (MPG), adequado para modelagem de nuvens leves ou neutras, a fim de ilustrar a especificidade da modelagem de gás denso.

A substância escolhida para ser modelada foi a amônia, substância de grande emprego industrial e que, não obstante não seja, a princípio, caracterizada como um gás denso, se comporta como tal nas condições de liberações acidentais a partir de tanque pressurizados.

As áreas geradas na modelagem da dispersão atmosférica da liberação acidental de amônia nos *softwares* selecionados para o exercício, ao nível do solo e para as condições de liberação especificadas, variaram consideravelmente, sendo os desvios médios entre as distâncias alcançadas na direção do vento maiores nas concentrações mais altas dentro de cada cenário avaliado, ou seja, nas proximidades em que ocorre a liberação de produto, exatamente na faixa em que predominam os efeitos da gravidade.

Não obstante, mesmo em locais mais afastados do ponto de liberação houve diferenças entre as previsões dos *softwares*, sugerindo, ainda, diferenças na forma como é feita a modelagem da transição entre o regime de gás denso e o regime de dispersão passiva ou mesmo nos próprios modelos de dispersão passiva embutidos dentro de cada um dos *softwares* de risco considerados.

Entretanto, as variações entre os resultados das distâncias alcançadas nas simulações permaneceram dentro de um fator de 2, ratificando os resultados descritos na literatura para o desempenho deste tipo de modelo de dispersão atmosférica (HANNA et al., 2008).

A verificação da suscetibilidade da estimativa do risco de uma mesma instalação à diferentes modelagens de dispersão foi feita com base na expressão de risco individual gerada pela instalação de amônia pressurizada.

O gráfico do risco individual em função da distância fornecido para cada modelagem de dispersão mostra que é possível chegar à estimativa diferente do risco posto por uma mesma instalação em função desta modelagem, mesmo mantendo-se mais próximos quanto possível as condições de entrada na etapa de avaliação de consequências, sobretudo, o mesmo termo fonte, especialmente quando a região de interesse estiver afastada da fonte de liberação.

Este fato foi constatado especialmente entre os *softwares* Phast e Effects em decorrência de suas diferentes abordagens matemáticas.

Entretanto, quando a região de interesse na análise de risco está nas proximidades da fonte da liberação acidental, observa-se que o resultado do risco individual gerado em cada um dos *softwares* usados fica razoavelmente próximo.

Desta forma, conclui-se que as diferentes modelagens de dispersão atmosférica de gás denso embutidas em *softwares* comumente usados em análise de risco produzem expressões de risco individual diferentes e podem levar a decisões baseadas em risco diferentes para a mesma instalação.

Uma alternativa para evitar a variabilidade na estimativa de risco de uma instalação industrial em função da modelagem de dispersão adotada na etapa de estimativa de consequências, tendo em vista a uniformização de estudos de análise de risco, seria a padronização de um *software* único de risco para este tipo de análise, o que já é feito em países com mais tradição no uso da ferramenta.

Por último, é válido salientar que os resultados e conclusões apresentados nesta dissertação são específicos para as condições de modelagem e cenários acidentais adotados. Não é possível concluir, de uma forma geral, que as modelagens aqui avaliadas também produzirão resultados diferentes, ou mesmo da mesma ordem de grandeza, em condições diferentes das tratadas aqui ou mesmo com substâncias diferentes da adotada neste estudo.

Como sugestões para trabalhos futuros tem-se a inclusão de diferentes condições na modelagem da dispersão atmosférica como, por exemplo, taxas de vazamentos intermitentes, diferentes condições meteorológicas ou topográficas ou mesmo substâncias químicas diferentes.

Outro aspecto interessante a ser investigado seria o estudo da modelagem da transição entre regimes de gás denso e regime de dispersão passiva e os próprios modelos de dispersão passiva embutidos dentro de cada *software* de risco.

A inclusão de outras estratégias de modelagem de dispersão atmosférica, além dos modelos operacionais, como os modelos bidimensionais ou os modelos de abordagem Lagrangeana no escopo de análise de risco de instalações industriais também é um aspecto interessante a ser seguido.

Nessa matéria, ressalte-se a importância crescente no escopo de análise de risco dos modelos tipo CFD por permitirem estudar a dispersão em condições mais próximas da realidade em que uma liberação acidental deve ocorrer (como a presença de obstáculos ou terrenos complexos).

Seria interessante também a inclusão de um número maior de cenários acidentais neste estudo, para se analisar o impacto das diferentes modelagens em um conjunto de cenários acidentais mais abrangente na expressão de risco.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANFOSSI, D.; TINARELLI, G.; CASTELLI, S. T.; NIBART, M.; OLRVY, C.;
COMMANAY, J. A new Lagrangian particle model for the simulation of dense gas
dispersion. **Atmospheric Environment**, v. 44, p. 753-762, 2010.
- AL-SHANINI, A.; AHMAD, A.; KHAN, F. Accident modelling and analysis in process
industries. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 32, p.
319-334, Nov. 2014.
- ABIQUIM. Associação Brasileira da Indústria Química – **Guia da Indústria Química
Brasileira 2013/2014**, 2013. 465 p.
- BARAD, M. L. Project Prairie Grass, a field program in diffusion, **Geophysical
Research papers**, n. 59, Jul. 1958. 280 p.
- BONVICINI, S.; GANAPINI, S.; SPADONI, G.; COZZANI, V. The description of
population vulnerability in quantitative risk analysis. **Risk Analysis**, v. 32, n.9, p.
1576-1594, Feb. 2012.
- BOOT, H. Quantifying safety with QRA: To agree on the results, the method should
be explicit. **Chemical Engineering Transaction**, vol. 31, 2013.
- _____. Developments in consequence modelling of accidental releases of
hazardous materials. **Safety Engineering Series**, vol VII, 2012.
- BOUET, R.; DUPLANTIER, S.; SALVI, O. Ammonia large scale atmospheric
dispersion experiments in industrial configurations. **Journal of Loss Prevention
in the Process Industries**, v. 18, p. 512-519, 2005.
- BRAMBILLA, S.; MANCA, D. The Viareggio LPG railway accident: event
reconstruction and modeling. **Journal of Hazardous Materials**, v.182, n.1-3, p.
346-357, Oct. 2010.
- BRAMBILLA, S.; MANCA, D.; WILLIAMS, M. D.; GOWARDHAN, A.; BROWN, A. **A
shallow water model for dense gas simulation in urban areas**. Symposium
on Urban Environment, Phoenix, 2009.
- BRIGHTON, P. W. M.; BYRNE, A. J.; CLEAVER, R. P.; COURTIADÉ, P.; CRABOL,
B.; FITZPATRICK, R. D; GIRARD, A.; JONES, S. J.; LHOMME, V.; MERCER, A.;
NEDELKA, D.; PROUX, C.; WEBBER, D. M. Comparison of heavy gas
dispersion models for instantaneous release. **Journal of Hazardous Materials**,
v. 36, p. 193-208, 1994.
- BRITTER, R.; WEIL, J.; LEUNG, J.; HANNA, S. Toxic industrial chemical (TIC)
source emissions modeling for pressurized liquefied gases. **Atmospheric
Environment**, v. 45, n. 1, p. 1-25, Jan. 2011.
- BRITTER, R. E. **Recent research on the dispersion of hazardous materials**.
Luxembourg: Office for Official Publications of the European Communities, 1998.
234 p.
- BRITTER, R. E. Atmospheric dispersion of dense gas. **Annual Review of Fluid
Mechanics**, v. 21, p. 317-344, 1989.
- BRITTER, R. E.; McQUAID, J. **Workbook on the dispersion of dense gases**. HSE
Contract Research Report n. 17/1988. Health and Safety Executive (HSE), 1988.

- BROWN, T. C.; CEDERWALL, R. T.; CHAN, S. T.; ERMAK, D. L.; KOOPMAN, R. P. Falcon Series Data Report., Lawrence Livermore National Laboratory, 1990. 665 p.
- BUBBICO, R.; MAZZAROTA, B. Accidental release of toxic chemicals: influence of the main input parameters on consequence calculation. **Journal of Hazardous Materials**, v. 151, p. 394-406, 2008.
- BUBBICO, R.; MAZZAROTTA, B.; VERDONE, N. CFD analysis of the dispersion of toxic materials in road tunnels, **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 28, p. 47-59, 2014.
- BUSINGER, J. A.; WYNGAARD, J. C.; IZUMI, Y.; BRADLEY, E. F. Flux-profile relationships in the atmospheric surface layer. **Journal of Atmospheric Science**, n. 28, p. 181-189, 1971.
- CARPENTER, R. J.; CLEAVER, R. P.; WAITE, P. J.; ENGLISH, M. A. The calibration of a simple model for dense gas dispersion using the Thorney Island Phase I trials data. **Journal of Hazardous Materials**, v. 16, p. 293-313, 1987.
- CASAL, J. **Evaluation of the effects and consequences of major accidents in industrial plants**. Hungary: Industrial Safety Series, v. 8 Elsevier BV, 2008. 371p.
- CCPS. Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers. **Guidelines for developing quantitative safety risk criteria**. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2009. 211 p.
- _____. **Guidelines for chemical process quantitative risk analysis**. 2nd ed. New York: Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers, 2000. 754 p.
- _____. **Guidelines for consequence analysis of chemical releases**. New York: Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers. 1999. 324 p.
- CEC. Council of the European Communities. **Council Directive of 9 December 1996 On the control of major accidents hazards involving dangerous substances (96/82/EC)**. Official Journal of the European Communities, n. L10, p. 13-33, Jan.1997.
- _____. **Council Directive of 24 June 1982 On the major accident hazards of certain industrial activities (82/501/EEC)**. Official Journal of the European Communities, n. L230, p. 1-18, Aug. 1982.
- CERC. Cambridge Environmental Research Consultants. **GASTAR 3.2 - User manual**, 2009. Disponível em: <<http://www.cerc.co.uk/>>. Acesso em: 27 out. 2015.
- CETESB. Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Norma CETESB P4.261 - Risco de Acidente de Origem Tecnológica - Método para decisão e termos de referência**, Dez. 2011. 140 p.
- CHEN, C.; WANG, T.; CHEN, L.; DAI, J.; SHU, C. Loss prevention in the petrochemical and chemical process high-tech industries in Taiwan. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 23, p. 531-538, 2010.

- CHRISTOU, M.; GYENES, Z.; STRUCKL, M. Risk assessment in support to land-use-planning in Europe: towards more consistent decisions? **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 24, n. 3, p. 219-226, May 2011.
- CHRISTOU, M. D.; AMENDOLA, A.; SMEDER, M. The control of major accident hazards: the land-use planning issue. **Journal of Hazardous Materials**, v. 65, p. 151-178, 1999.
- CLEAVER, P.; JOHNSON, M.; HO, B. A summary of some experimental data on LNG safety. **Journal of Hazardous Materials**, v. 140, p. 429-438, 2007.
- CLEAVER, R. P.; COOPER, M. G.; HALFORD, A. R. Further development of a model for dense gas dispersion over real terrain. **Journal of Hazardous Materials**, v. 40, p. 85-108, 1995.
- CNI. National Confederation of Industry. **The brazilian chemical industry road to sustainability**. Brasília, 2012. 86 p.
- COZZANI, V.; BANDINI, R.; BASTA, C.; CHRISTOU, M. Application of land-use planning criteria for the control of major accident hazards: a case-study. **Journal of Hazardous Materials**, v. A136, p. 170-180, 2006.
- COX, R. A. Methods for predicting the atmospheric dispersion of massive releases of flammable vapour. **Progress in Energy and Combustion Science**. v. 6, p. 141-149, 1980.
- CPR 14E. Committee for the Prevention of Disaster publication 14E. **Methods for the calculations of physical effects** - due to releases of hazardous materials (liquids and gases) - The Yellow Book. 3rd ed. The Hague: C. J. H. van den Bosch, R. A. P. M. Weterings, 2005, 451 p.
- CPR 18E. Committee for the Prevention of Disaster publication 18E. **Guidelines for quantitative risk assessment** - The Purple Book. The Hague: Dec. 2005.
- CROWL, D. A.; LOUVAR, J. F. **Chemical process safety - Fundamentals with applications**. 3rd ed. Massachusetts, Prentice Hall, 2011. 723 p.
- CSB. US Chemical Safety Board. **Caribbean Petroleum Refining Tank Explosion and Fire** – Final Investigation Report - Caribbean Petroleum, 2015. Disponível em: <<http://www.csb.gov/caribbean-petroleum-refining-tank-explosion-and-fire/>>. Acesso em: 28 out. 2015.
- _____. **BP America Refinery Explosion**– Final Investigation Report – Refinery explosion and fire, 2007. Disponível em: <<http://www.csb.gov/bp-america-refinery-explosion>>. Acesso em: 28 out. 2015.
- DAVIDSON, G. A. Gaussian versus top-hat profile assumption in integral plume models. **Atmospheric Environment**, v. 20, p. 471-478, 1986.
- DEMAEL, E.; CARISSIMO, B. Comparative evaluation of an Eulerian CFD and Gaussian Plume Models based on Prairie Grass dispersion experiment. **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, v. 47, p. 888-900, Mar. 2008.
- DÍAZ, G. J. C.; ZAFRILLA, .G. J. M. Uncertainty and sensitive analysis of environmental model for risk assessment : an industrial case study. **Reliability Engineering and System Safety**, v. 107, p. 16-22, Nov. 2012.

- DUIJM, N. J.; CARISSIMO, B.; MERCER, A.; BARTHOLOME, C.; GIESBRECHT, H. Development and test of an evaluation protocol for heavy gas models. **Journal of Hazardous Materials**, v. 56, p. 273-285, 1997.
- EIDSVIK, K. J. A model for heavy gas dispersion in the atmosphere. **Atmospheric Environment**, v. 14, p. 769-777, 1980.
- EPSTEIN, M.; FAUSKE, H. K.; HAUSER, G. M. A model of the dilution of a forced two-phase chemical plume in a horizontal wind. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 3, p. 280-290, 1990.
- ERMAK, D. L. **Users Manual for SLAB: an atmospheric dispersion model for denser than air releases**. UCRL-MA-105607, Lawrence Livermore National Lab, Livermore, Califórnia, 1990. 144 p.
- FABBRI, L.; CONTINI, S. Benchmarking on the evaluation of major accident-related risk assessment. **Journal of Hazardous Materials**, v. 162, p. 1465-1476, 2009.
- FANNELOP, T. K. **Fluid mechanics for industrial safety and environmental protection**. Amsterdam: Elsevier Science B.V., 1994. 523 p.
- FARMER, F. R. Reactor safety and siting: a proposed risk criterion. **Nuclear Safety**, v. 8, n. 6, p. 539-548, 1967.
- FAY, J. A.; ZEMBA, S. G. Integral model of dense gas plume dispersion. **Atmospheric Environment**, v. 20, n. 7, p. 1347-1354, 1986.
- FERC. FEDERAL ENERGY REGULATORY COMMISSION. **Evaluation of DEGADIS 2.1 using Advisory Bulletin ADB-10-07**. Disponível em: <https://www.ferc.gov/industries/gas/indus-act/Ing/degadis-report.pdf>. Washington, 2011. 56p. Acesso em: 28 out. 2015
- FINNEY, D. J. **Probit Analysis**. 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1971. 333 p.
- FREITAS, C. M.; PORTO, M. F. D.; GOMES, C. M. Acidentes químicos ampliados: um desafio para a saúde pública. **Revista de Saúde Pública**, v. 29, n. 6, p. 503-514, 1995.
- FTHENAKIS, V. M. HGSYSTEM - A review, critique and comparison with other models. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, n. 12, p. 525-531, 1999.
- FRUTUOSO, P. F. F. M. **Notas de aula da disciplina PNV 5022 – Confiabilidade humana**, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2014.
- GALEEV, A. D.; SALIN, A. A.; PONIKAROV, S. I. Consequence analysis of aqueous ammonia spill using computational fluid dynamics. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, 26, p. 628-638, 2013.
- GARIAZZO, C.; PELLICIONI, A.; BRAGATTO, P. Simulation of accidental release by means of two different modeling approaches. **Chemical Engineering Transactions**, v. 26, p. 555-560, 2012.
- GIFFORD, F. A. Turbulent diffusion – typing schemes: a review. **Nuclear Safety**, v.17, n.1, p. 68-86, 1976.
- GRIFFITHS, R. F.; KAISER, G. D. Production of dense gas mixtures from ammonia release - a review. **Journal of Hazardous Materials**, v. 6, p. 197-212, 1982.

- GREENSHIELDS, C. J. OpenFOAM – The open source CFD Tollbox User Guide. OpenFOAM Foundation, 2015.
- GUHA-SAPIR, D.; BELOW, R.; HOYOIS, Ph. **EM-DATA - The International Disaster Database**. Disponível em: <<http://emdat.be>>. Université Catholique de Louvain – Brussels – Belgium. Acesso em: 28 out. 2015.
- HANKIN, R. K. S. Heavy gas dispersion integral models and shallow layer models. **Journal of Hazardous Materials**, v. A103, p. 1-10, Jun. 2003.
- HANKIN, R. K. S.; BRITTER, R. E. TWODEE: The Health and Safety Laboratory's Shallow Layer Model for Heavy Gas Dispersion. Part I: Mathematical Basis and Physical Assumptions. **Journal of Hazardous Materials**, v. 66, p. 211-226, 1999.
- HANNA, S.; BRITTER, R.; ARGENTA, E.; CHANG, J. The Jack Rabbit chlorine release experiments: implications of dense gas removal from a depression and downwind concentrations. **Journal of Hazardous Materials**, v. 213-214, p. 406 - 412, 2012.
- HANNA, S. R.; HANSEN, O. R.; ICHARD, M.; STRIMAITIS, D. CFD model simulation of dispersion from chlorine railcar release in industrial and urban areas. **Atmospheric Environment**, n. 43, p. 262-270, 2009.
- HANNA, S. R.; DHARMAVARAN, S.; ZHANG, J.; SYKES, I.; WITLOX, H.; KHAJEHNAJAF, S.; KOSLAN, K. Comparison of six widely-used dense gas dispersion models for three recent chlorine railcar accidents. **Process Safety Progress**, n. 3, v. 27, p. 248-259, 2008.
- HANNA, S. R.; DRIVAS, P. J.; CHANG, J.C. **Guidelines for the use of vapor cloud dispersion models**. 2nd ed. New York: Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers, 1996. 147 p.
- HANNA, S. R., CHANG, J. C.; STRIMAITIS, D. G. Hazardous gas model evaluation with field observation. **Atmospheric Environment**, v. 27A, n. 15, p. 2265-2285, 1993.
- HANNA, S. R.; STRIMAITIS, D. G.; CHANG, J. C. Evaluation of fourteen hazardous gas model with ammonia and hydrogen fluoride field data. **Journal of Hazardous Materials**, v. 26, p. 127-158, 1991.
- HANSEN, O. R.; GAVELLI, F.; ICHARD, M.; DAVIS, S. G. Validation of FLACS against experimental data sets from the model evaluation database for LNG vapor dispersion. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 23, p. 857-877, 2010.
- HANSLER, R. J.; GOOIJER, L.; WOLTING, B. G. Acute inhalation toxicity in quantitative risk assessment - methods and procedures. **Chemical Engineering Transactions**, v. 31, 2013.
- HARDY, T. L. **Software and system safety** – Accidents, incidents and lessons learned. AuthorHouse, Bloomington, 2012. 327 p.
- HARPER, M.; WITLOX, H. W. M. UDM Theory Document. Version 6.7 DNV Report. London: Det Norske Veritas, Jun. 2011. 148 p.
- HAVENS, J. **A dispersion model for elevated dense gas jet chemical releases**, Volume I. Environmental Protection Agency, 1988.

- HAVENS, J.; SPICER, T. O. Application of dispersion models to flammable cloud analysis. **Journal of Hazardous Materials**, v. 49, p. 115 - 124, 1996.
- HOOT, T. G.; MERONEY, R. N.; PETERKA, J. A. **Wind tunnel tests of negatively bouyant plumes**. NTIS Report PB-231-590. Environmental Protection Agency, Washington, Oct. 1973. 104p.
- INERIS. Institut National de l'environnement Industriel et des Risques. Work Study 10072: **Ammonia: large-scale atmospheric dispersion tests**, 2005. 130p.
- IBGE. Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística. Séries Históricas e Estatísticas. 2010. Disponível em: <http://seriesestatisticas.ibge.gov.br/series.aspx?vcodigo=POP122>. > Acesso em: 23 out. 2015.
- IRWIN, J. S. A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability. **Atmospheric Environment**, v.13, p. 191-194, 1979.
- IVINGS, M. J.; LEA, C. J.; WEBBER, D. M.; JAGGER, S. F.; COLDRICK, S. A protocol for the evaluation of LNG vapour dispersion models. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 26, n.1, p.153-163, Jan. 2013.
- JACOBSON, M. Z. **Fundamentals of atmospheric modeling**. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2005. 813 p.
- JOHNSON, D. M. The potential for vapour cloud explosions – lessons from the Buncefield accident. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 23, n. 6, p. 921-927, Nov. 2010.
- JONES, R.; LEHR, W.; SIMECEK-BEATTY, D.; REYNOLDS, R. M. ALOHA® (Areal Locations of Hazardous Atmospheres 5.4.4: Technical Documentation. U. S. Dept. of Commerce, NOAA Technical Memorandum NOS OR&R 43. Seattle, WA: Emergency Responde Division, NOAA, 2013. Disponível em: <https://www.epa.gov/comeo/aloha-software> >. Acesso em: 22 mar. 2016.
- JONKMAN, S. N.; GELDER, P. H. A. J. M. van; VRIJLING, J. K. An overview of quantitative risk measure for loss of life and economic damage. **Journal of Hazardous Materials**, v. A99, p. 1-130, 2003.
- KAISER, G. D.; WALKER, B. C. Releases of anhydrous ammonia from pressurized containers – the importance of denser-than-air mixtures. **Atmospheric Environment**, v. 12, p. 2289-2300, 1978.
- KAISER, G. D.; PRICE, J. D.; URDANETA, J. **Technical background document for offsite consequence analysis for anhydrous aqueous ammonia, chlorine and sulfur dioxide**. Virginia: U.S. Environmental Protection Agency, 1999. 69 p.
- KAKKO, R. Computer aided consequence analysis and some future needs. **Journal of Hazardous Materials**, v. 26, p. 105-125, 1991.
- KHAN, F. I.; ABBASI, S. A. Modelling and simulation of heavy gas dispersion on the basis of modifications in the plume path theory. **Journal of Hazardous Materials**, v. A80, p. 15-30, Jul. 2000.
- _____. Techniques and methodologies for risk analysis in chemical process industries. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, n. 11, p. 261-277, 1998.

- KISA, M.; JELEMENSKÝ, L. CFD dispersion modelling for emergency preparedness. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 22, p. 97-104, 2009.
- KOOPMAN, R. P.; ERMAK, D. L. Lessons learned from LNG safety research. **Journal of Hazardous Materials**, v.140, p. 412-428, 2007.
- KOOPMAN, R. P.; ERMAK, D. L.; CHAN, T. S. A review of recent field tests and mathematical modelling of atmospheric dispersion of large spills of denser-than-air gases. **Atmospheric Environment**, v. 23, n. 4, p. 731-745, 1989.
- KUKKONEN, J.; KULMALA, M.; NIKMO, J.; VESALA, T. WEBBER, D. M.; WREN, Y. The homogeneous equilibrium approximation in models of aerosol cloud dispersion. **Atmospheric Environment**, v. 28, n. 17, p. 2763-2776, 1994.
- LARSEN, G. C.; MACHEFAUX, E.; CHOUGULE, A. Wake meandering under non-neutral atmospheric stability conditions – theory and facts. **Journal of Physics: Conference Series**, n. 625, p. 1-10, 2015.
- LAURIDSEN, K.; KOZINE, I.; MARKERT, F.; AMENDOLA, A.; CHRISTOU, M.;FIORI, M. Assessment of uncertainties in risk analysis of chemical establishments, The ASSURANCE Project, Final summary report, Riso National Laboratory, 2002. Disponível em <http://orbit.dtu.dk/files/7712279/ris_r_1344.pdf> Acesso em: 28 mar. 2016.
- LEE, C.; KIM, B.; KO, S., A new Lagrangian stochastic model for the gravity slumping spreading motion of a dense gas. **Atmospheric Environment**, v.41, p. 7874-7886, 2007.
- LEES, F. P. **Loss Prevention in the Process Industries - Hazard Identification Assesment and Control – Volume 1**. 2nd ed. Oxford: Reed Educational and Professional Publishing, 1996.
- LEELOSSY, A.; MOLNAR, F. J.; IZSAC, F.; HAVASI, A.; LAGZI, I.; MESZAROS, R. Dispersion modeling of air pollutants in the atmosphere: a review. **Central European Journal of Geosciences**, v. 6(3), p. 257-278, May 2014.
- LICARI, F. A. Performance metrics for evaluating liquefied natural gas, vapor dispersion models. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, n. 23, p. 745-753, 2010.
- LINES, I. G.; DEAVES, D. M.; ATKINS, W. S. Practical modelling of gas dispersion in low wind speed conditions for application in risk assesment. **Journal of Hazardous Materials**, v. 54, p. 201-226, 1997.
- LUKETA-HANLIN, A. A review of large-scale LNG spills: experiments and modeling. **Journal of Hazardous Materials**, n. A132, p. 504-517, 2006.
- LUKETA-HANLIN, A.; KOOPMAN, R. P.; ERMAK, D. L. On the application of computational fluid dynamics codes for liquefied natural gas dispersion. **Journal of Hazardous Materials**, v. 140, p. 119-140, 2007.
- e-MARS. **Major Accident Reporting System (MARS ou e-MARS)**. Joint Research Centre of the European Union. Disponível em: <<https://emars.jrc.ec.europa.eu/?id=4>>. Acesso em: 28 out. 2015.
- MANNAN, M. S. Trevor Kletz´s impact on process safety and a plea for good science: An academic and research perspective. **Process Safety and Environmental Protection**, v. 90, p. 343-348, 2012.

- MANNAN, M. S.; WEST, H. H.; KRISHNA, K.; ALDEEB, A. A.; KEREN, N.; SARAF, S. R.; LIU, Y.; GENTILE, M. The legacy of Bhopal: the impact over the last 20 years and future directions. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, n.18, p. 218-224, 2005.
- MARX, J. D.; CORNWELL, J. B. The importance of weather variation in a quantitative risk analysis. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, n. 22, p. 803-808, 2009.
- MAZZOLDI, A.; HILL, T.; COLLS, J.J. CFD and Gaussian atmospheric dispersion models: A comparison for leak from carbon dioxide transportation and storage facilities. **Atmospheric Environment**, 42, 8046-8054, 2008.
- McGRATTAM, K.; KLEIN, B.; HOSTIKKA, S.; FLOYD, J. **Fire Dynamics Simulator (Version 5) User's guide**. NIST Special Publication 1019-5, 2008. Disponível em: <<http://fire.nist.gov/bfrlpubs/fire07/PDF/f07053.pdf>> Acesso em: 28 mar. 2015.
- MELHEM, G. A. **Advanced consequence analysis**. New Hampshire: ioMosaic Corporation, 2006. 880 p.
- MELLO, L. S. DE. **Planejamento urbano e riscos tecnológicos: uma análise em Camaçari/BA, no entorno do complexo petroquímico**. 2011. 148 p. Dissertação apresentada à Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2011.
- MERCER, A.; BARTHOLOME, C.; CARISSIMO, B.; DUIJM, N.J.; GIESBRECHT, H.I. **Heavy gas dispersion expert group**. Luxembourg: Official Publication of the European Commission - Environment and Climate Programme EUR17778, 1998.
- MERONEY, R. N. CFD modeling of dense gas cloud dispersion over irregular terrain. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 104-106, p. 500-508. Mar 2012.
- MERONEY, R. N. Guidelines for fluid modeling of dense gas cloud dispersion. **Journal of Hazardous Materials**, v. 17, p. 23-46, 1987.
- MIDDHA, P.; HANSEN, O. R.; GRUNE, J.; KOTCHOURKO, A. CFD calculations of gas leak dispersion and subsequent gas explosion: validation against ignited impinging hydrogen jet experiments. **Journal of Hazardous Materials**, v. 179, p.84-94, 2010.
- MIHAILIDOU, E. K.; ANTONIADIS, D. A.; ASSAEL, M. J. The 319 major industrial accidents since 1917. **International Review of Chemical Engineering**, v. 4, n.6, p.529-540, Nov. 2012.
- MODARRES, M.; KAMINSKIY, M.; KRIVTSOV, V. **Reliability Engineering and Risk Analysis**. New York : Marcel Dekker, 1999, 454 p.
- MOHAN, M.; SIDDIQUI, T.A. Analysis of various schemes for the estimation of atmospheric stability classification. **Atmospheric Environment**, v. 32, n. 21, p. 3775-3781, 1998.
- MONTOYA, M. I.; PLANAS, E.; CASAL, J. A comparative analysis of mathematical models for relating indoor and outdoor toxic gas concentration in accidental releases. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, n. 22, p. 381-391, Jan. 2009.

- NIELSEN, M. **Dense gas dispersion in the atmosphere** - R-1030. Riso National Laboratory, Dinamarca, Sep. 1998. 276 p.
- NIVOLIANITOU, Z.; KONSTANDINIDOU, M.; CHRISTOU, M. Statistical Analysis of major accidents in petrochemical industry notified to the major accident reporting system (MARS). **Journal of Hazardous Materials**, v. A137, p. 1-7, 2006.
- NUSSEY, C.; MERCER, A.; CLAY, G.A. Consequences: toxic aspects of two phase release. **Journal of Loss Prevention Process Industries**, v. 3, p.156-166, 1990.
- OFCM. Office of the Federal Coordinator for Meteorology. 2001. Disponível em: <http://www.ofcm.gov/atd_dir/pdf/>. Acesso em: 28 out. 2015.
- OOMS, G. A new method for the calculation of the plume path of gases emitted by a stack. **Atmospheric Environment**, v. 6, p. 899-909, May 1972.
- PANDYA, N.; GABAS, N.; MARSDEN, E. Sensitivity analysis of PHAST's atmospheric dispersion model for three toxic materials (nitric oxide, ammonia, chlorine). **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 25, n. 1, p. 20-32, Jan. 2012.
- PASMAN, H.; RENIERS, G. Past, present and future of quantitative risk assessment (QRA) and the incentive it obtained from land-use planning (LUP). **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 28, p. 2-9, Apr. 2014.
- PASMAN, H. J. History of Dutch process equipment failure frequencies and the Purple Book. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, n. 24, p. 208-213, May 2011.
- PASMAN, H. J.; JUNG, S.; PREM, K.; ROGERS, W. J.; YANG, X. Is risk analysis a useful tool for improving process safety? **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 22, p. 769-777, 2009.
- PASQUILL, F.; SMITH, F. B. **Atmospheric diffusion - study of the dispersion of windborne material from industrial and other source**. Ellis Horwood Series in Environmental Science, Chichester, 1983. 437 p.
- PATRA, A. K. Influence of wind speed profile and roughness parameters on the downwind extension of vulnerable zones during dispersion of toxic dense gases. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, n. 19, p. 478-480, May 2006.
- PETERSEN, K. E. The EU model evaluation group. **Journal of Hazardous Materials**, v. 65, p. 37-41, 1999.
- PERROW, C. **Normal Accidents – Living with high-risk technologies**, Princeton University Press. New Jersey, 1999. 451 p.
- PHMSA. Pipeline and Hazardous Materials Safety Administration of the U.S. Department of Transportation. **PHMSA Docket n. 2011-0075 on Phast/UDM**. Washington, 2011. 27p.
- PONTIGGIA, M.; DERUDI, M.; ALBA, M.; SCAIONI, M.; ROTA, R. Hazardous gas release in urban areas: assessment of consequences through CFD modelling. **Journal of Hazardous Materials**, v. 176, p. 589-596, 2010.
- PREM, K. P.; NG, D.; PASMAN, H. J.; SAWYER, M.; GUO, Y.; MANNAN, M. S. Risk measures constituting a risk metrics which enables improved decision making:

- value-at-risk. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 23, p. 211-219, 2010.
- PUTTOCK, J. S. Comparison of Thorney Island data with predictions of HEGABOX / HEGADAS. **Journal of Hazardous Materials**, n. 16, p. 439-455, Mar. 1987.
- PUTTOCK, J. S.; BLACMORE, D. R.; COLENBRANDER, G. W. Field experiments on dense gas dispersion. **Journal of Hazardous Materials**, v. 6, p. 13-41, 1982.
- RASMUSSEN, N. C. **Reactor safety study: An assessment of accident risks in U.S. commercial nuclear power plants** [NUREG-75/014 (WASH-1400). US Nuclear Regulatory Commission, Rockville, USA, 1975. 198 p.
- RISKAN, Sereno Sistemas. **RISKAN Risk Analysis Essentials** - Manual do usuário, 2000.
- RIVM. NATIONAL INSTITUTE OF PUBLIC HEALTH. **Reference Manual Bevi Risk Assessment**. Version 3.2. Bilthoven, 2009.
- SALAZAR, M. P.; MARTINS, M. R. Atmospheric dense gas dispersion models and their influence in the risk analysis studies assessment in the scope of the standard CETESB P4.261, **25th European Safety and Reliability Conference (ESREL)**. Switzerland, 2015.
- SCHLEDER, A. M.; MARTINS, M. R. The use of integrals and CFD tools to evaluate the cloud dispersion of flammable and toxic substances leakages. **Safety, Reliability and Risk Analysis: Beyond the horizon**, London, p. 1889-1894, 2014.
- SEINFELD, J. H; PANDIS, S. M. **Atmospheric chemistry and physics**. 2nd ed. New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2006. 1203 p.
- SENGUPTA, A.; BANDYOPADHYAY, D.; VAN WESTEN, C. J.; VAN DER VEEN, A. Is a QRA-based method suitable to guide Land Use Planning decisions in India? **Safety and Reliability: Methodology and Applications**, p. 1401-1409, 2015.
- SKLAVOUNOS, S.; RIGAS, F. Simulation of Coyote series trials part I: CFD estimation of non isothermal LNG releases and comparison with box models predictions. **Chemical Engineering Science**, n. 61, p. 1434-1443, 2006.
- SPICER, T.; HAVENS, J. **User's guide for DEGADIS 2.1 Dense gas dispersion model**. 1989. Disponível em: http://www.epa.gov/ttn/scram/dispersion_alt.htm#DEGADIS>. Acesso em: 28 out. 2015.
- SPICER, T. O.; HAVENS, J. A. Field test validation of the DEGADIS model. **Journal of Hazardous Materials**, 16, p. 231-245, Feb. 1987.
- STULL, R. B. **Meteorology for scientists and engineers**. 2nd ed. California: Brooks/Cole, Cengage Learning, 2000. 502 p.
- SYKES, R. I.; CERASOLI, C. P.; HENN, D. S. The representation of dynamic flow effects in a Lagrangian puff dispersion model. **Journal of Hazardous Materials**, n. A64, p. 223-247, 1999.
- SUN, B; UTIKAR, R. P.; PAREEK, V. K.; GUO, K. Computational fluid dynamics analysis of liquefied natural gas. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 26, p. 117-128, Jan. 2013.

- TAVARES, R. A. M. **Accidental release of hazardous gases: modelling and assessing risks**. Departamento de Ambiente e Ordenamento, Universidade de Aveiro. Tese de Doutoramento, 2011.
- TAVEAU, J. Risk assessment and land-use planning regulations in France following the AZF disaster. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v.23, p. 813-823, 2010.
- THE ROYAL SOCIETY, **Risk Assessment: a Study Group Report**. Bedfordshire: Inprint of Luton, 1983. 198 p.
- TICKLE, G. A.; CARLISLE, J. E. Extension of the dense gas dispersion model DRIFT to include buoyant lift-off and buoyant rise. HSE Books, 2008.
- TIXIER, J.; DUSSERRE, G.; SALVI, O.; GASTON, D. Review of 62 risk analysis methodologies of industrial plants. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v.15, p. 291-303, 2002.
- TNO. Department of Industrial Safety of the the Netherland Organisation of Applied Scientific Research. **EFFECTS, DAMAGE, EFFECTSPLUS EFFECTSGIS - User and reference manual**. 2003.
- UIJT de HAAG, P. A. M.; GOOIJER, L.; KOOI, E. S.; SPOELSTRA, M. B. Evaluation of the use of the prescribed quantitative risk assessment method for land use planning in the Netherlands. **Chemical Engineering Transactions**, v. 31, 2013.
- VAN ULDEN, A. P. **The spreading and mixing of dense gas clouds in still air**, Debilt: Scientific Report WR 87-12, 1987. 107 p.
- VENART, J. E. S. Flixborough: a final footnote. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 20, p. 621-643, 2007.
- VENETSANOS, A. G.; BARTZIS, J. G.; WURTZ, J.; PAPAILIOU, D. D. DISPLAY-2: a two-dimensional shallow layer model for dense gas dispersion including complex features. **Journal of Hazardous Materials**, n. A99, p. 111-144, 2003.
- VIERENDEELS, G.; RENIERS, G. L. L.; ALE, B. J. M. Modeling the major accident prevention legislation change process within Europe. **Safety Science** v. 49, n.3, p. 513-521, Mar. 2011.
- VILCHEZ, J. A.; ESPEJO, V.; CASAL, J. Generic event trees and probabilities for the release of different types of hazardous materials. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 24, p. 281-287, 2011.
- VILCHEZ, J. A.; PLANAS-CUCHI, E.; CASAL, J.; ARNALDOS, J. Calculating concentration contour co-ordinates using integral plume models. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 15, p. 507-515, 2002.
- WEBBER, D. M.; GANT, S. E.; IVINGS, M. J.; JAGGER, S. F. **LNG source term models for hazard analysis: a review of the state-of-art and approach to models assessment**. Health and Safety Executive Research Report RR789. Derbyshire: HSE Books, Mar. 2009. 78 p.
- WETTIG, J.; PORTER, S.; KIRCHSTEIGER, C. Major industrial accidents regulation in the Europe Union. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 12, p. 19-28, 1999.
- WHEATLEY, C. J.; WEBBER, D. M. **Aspects of the dispersion of denser than air vapours relevant to gas cloud explosions**. Luxembourg: Commission of

European Communities Nuclear Science and Technology. Report EUR 9592EN 1984. 449 p.

WITLOX, H. W. M.; HARPER, M.; PITBLADO, R. Validation of PHAST dispersion model as required for USA LNG siting applications. **Chemical Engineering Transactions**, vol. 31, 2013.

WITLOX, H. W. M.; HARPER, M.; PITBLADO, R. Sub-cooled and flashing liquid jets and droplet dispersion I. Overview and model implementation / validation. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v.23, p. 831-842, 2010.

WITLOX, H. W. M. The HEGADAS model for ground level heavy gas dispersion - steady state model. **Atmospheric Environment**, v.28, n.18, p. 2917-2932, 1994.

WOODWARD, J. L.; PITBLADO, R. M. **LNG risk based safety – modeling and consequence analysis**. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2010. 211 p.

WOODWARD, J. L.; HAVENS, J. A.; McBRIDE, W. C. A comparison with experimental data of several models for dispersion of heavy vapor clouds. **Journal of Hazardous Materials**, n. 6, p.161-180, 1982.

ZEMAN, O. The dynamics and modeling of heavier-than-air cold gas releases. **Atmospheric Environment**, v. 16, n. 4, p.741-751, 1982.

ZHOU, Y.; LIU, M. 2012. Risk assessment of major hazards and its application in urban planning: a case study. **Risk Analysis**, v. 32, n. 3, p. 566-577, 2012.

7 GLOSSÁRIO

Análise de risco: desenvolvimento da estimativa quantitativa do risco baseada em técnicas matemáticas para o cálculo da combinação da consequência e frequência de um incidente.

Cenário acidental: subdivisão de uma hipótese acidental diferenciada pelas tipologias acidentais e condições meteorológicas.

Dispersão passiva: é a dispersão atmosférica que ocorre em decorrência exclusivamente da turbulência atmosférica.

Dispersão gravitacional: processo em que uma nuvem densa se espalha horizontalmente no solo em decorrência da força hidrostática que resulta da diferença entre a densidade da nuvem e da atmosfera.

Dose tóxica: combinação de concentração e tempo para inalação de um produto tóxico para produzir um efeito tóxico específico.

Estabilidade atmosférica: medida do grau de turbulência atmosférica que resulta na dispersão de um gás. As classes de estabilidade atmosférica são definidas em termos da velocidade do vento e da radiação solar.

Gás denso: gás com densidade que excede a densidade do ar à temperatura ambiente.

Gás liquefeito pressurizado: gás que foi comprimido até sua pressão de saturação na temperatura de armazenamento, de forma que a maior parte do inventário se encontra na forma líquida.

Grande acidente: evento subitâneo do tipo grande emissão, incêndio ou explosão de grande magnitude resultante da perda no controle operacional levando um sério risco ao ser humano e / ou ao meio ambiente, de forma imediata ou retardada, dentro ou fora do estabelecimento, envolvendo uma ou mais substâncias perigosas.

Modelo de fonte ou modelo de termo fonte modelo usado para determinar a taxa de descarga, a quantidade total liberada (ou tempo total) na liberação de um material de um processo e o estado físico do material liberado e que será a entrada nos modelos de efeito físico.

Modelagem de consequência: desenvolvimento da estimativa numérica do efeito esperado de um incidente independente da sua frequência ou probabilidade.

Perigo: uma ou mais condições físicas ou químicas com potencial para causar danos às pessoas, à propriedade ou ao meio ambiente.

Probit: variável aleatória de média 5 e variância 1 usada em modelos de efeito. Modelos baseados em Probit derivados de dados de experimentos tipo dose-resposta, são usados frequentemente na estimativa dos efeitos que podem resultar da intensidade e duração a uma exposição a uma substância perigosa ou a uma condição (exemplo, exposição a uma atmosfera tóxica, exposição a uma radiação térmica).

Tank head: opção de modelagem no *software* Phast que indica o nível de líquido no tanque reservatório acima do ponto de liberação de produto.

Anexo I - Testes de campo de dispersão atmosférica

Testes de Prairie Grass

O teste experimental de Prairie Grass (BARAD, 1958) gerou o conjunto de dados sobre os quais os modelos de pluma gaussiana foram desenvolvidos, sendo ainda um conjunto de dados padrão para avaliação de modelos em liberações contínuas próximas ao solo em terreno plano (o comprimento de rugosidade era próximo de 0,006 m); os 68 testes foram feitos durante o verão de 1956 em O'Neill, Nebraska, ponto 1 na Figura 46 e consistiram de liberações de dióxido de enxofre a 0,46 m de altura.

Testes de Maplin Sands

Os testes de Maplin Sands, ponto 2 na Figura 45, foram feitos em 1980 pela Shell Research no estabelecimento experimental do Ministério da Defesa do Reino Unido localizado no litoral da Ilha Foulness, a cerca de 50 milhas a leste de Londres; os testes consistiram de 34 liberações de gás natural liquefeito (GNL) e propano liquefeito em água e dispersas sobre a água; foram conduzidas liberações contínuas e instantâneas (PUTTOCK; BLACKMORE, COLENBRANDER, 1982).

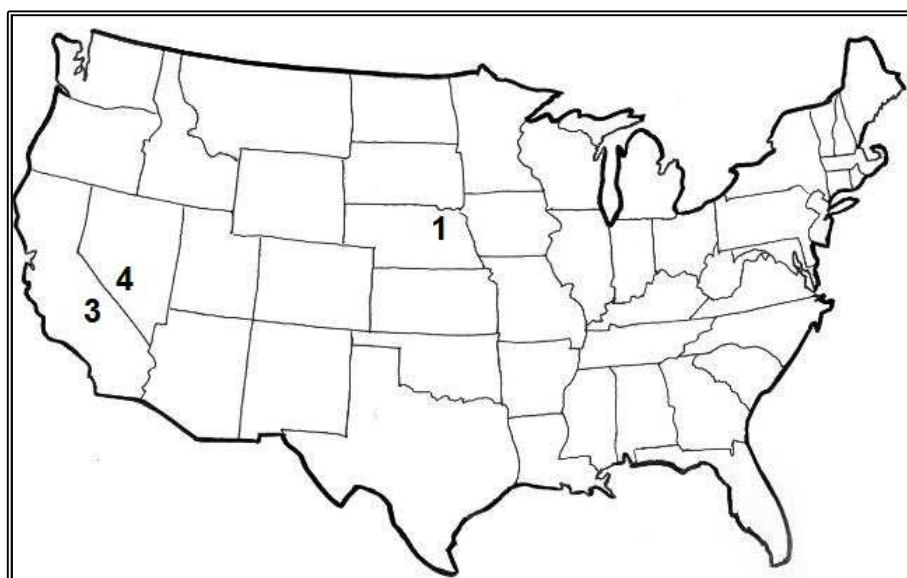
Figura 45 - Testes de Maplin Sands e Thorney Islands na Inglaterra.



Testes de Burro

Os testes de Burro, ponto 3 na Figura 46, foram feitos em 1980 pelo Centro de Armas Navais e pelo Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) no estabelecimento experimental do Centro de Armas Navais em China Lake, Califórnia, a cerca de 150 milhas ao norte de Los Angeles; os nove testes de Burro foram feitos para se determinar a dispersão de liberações contínuas de gás natural liquefeito em várias condições atmosféricas (KOOPMAN; ERMAK; CHAN, 1989).

Figura 46 - Testes de Burro, Coyote e Falcon nos Estados Unidos.



Testes de Coyote

Os testes de Coyote, ponto 3 na Figura 46, foram feitos em 1981 pelo Centro de Armas Navais e pelo Lawrence Livermore National Laboratory na mesma instalação experimental em que foram feitos os testes de Burro; os dez testes de Coyote foram feitos para a investigação da dispersão de gás natural liquefeito em várias condições atmosféricas para liberações contínuas, o comportamento de incêndios em nuvens e a ocorrência de RPT.

Thorney Island

Os testes de Thorney Island, ponto 5 na Figura 45, foram feitos entre 1982 e 1984 pelo Health and Safety Executive (HSE) na instalação experimental da Força Aérea Real em Thorney Island, costa sul da Inglaterra; os testes foram feitos para

determinar a dispersão de gases densos (mistura de Freon e N_2) em baixa velocidade de vento e condições atmosféricas estáveis para liberações contínuas e instantâneas; embora a quantidade de gás liberada seja inferior comparada com testes anteriores (2000 m^3 , contra 23000 m^3 em Burro), a liberação foi instantânea e a densidade alta fornecendo altos números de Richardson (CARPENTER; CLEAVER, 1987).

Deserto de Tortoise

O teste de grandes liberações de amônia foi feita pela LLNL na instalação de teste de Frenchman Flat, Nevada, ponto 4 na Figura 46, patrocinada pela Guarda Costeira americana e o Instituto de Fertilizantes (TFI) em 1983; o objetivo do teste foi obter dados de dispersão para liberações bifásicas de amônia pressurizada a temperatura ambiente.

Testes de Falcon

Os testes de Falcon, ponto 4 na Figura 46, foram feitos em 1987 pelo Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) na instalação experimental de Nevada do Departamento de Energia de Frenchman Flat, a cerca de 65 milhas a nordeste de Las Vegas patrocinada pelo Instituto de Pesquisa em Gás e o Departamento de Transporte americano; o teste envolveu uma série de cinco grandes liberações de gás natural liquefeito (20 a 66 m^3) contra um muro de $44\text{ m} \times 88\text{ m} \times 10\text{ m}$ de altura (BROWN et al., 1990).

Anexo II - Simulações adicionais

1) Estudo sobre influência do perfil de vento

Simulações feitas no Phast, único dos *softwares* estudados que permite variações no perfil de velocidade do vento, para avaliar a influência deste parâmetro na distância atingida pela nuvem; as simulações foram feitas com base no Cenário 1, até a concentração de 3979 ppm. A simulação feita com perfil de velocidade constante está apresentada na Figura 47 enquanto que a simulação feita com perfil exponencial de velocidade está apresentada na Figura 48. Os resultados mostram a influência considerável do perfil de velocidade de vento nos resultados obtidos. Nos

demais *softwares* não existe a possibilidade de escolher este perfil de velocidade de vento, sendo a velocidade do vento a 10 metros de altura o único parâmetro de entrada.

Figura 47 - Concentração com perfil de vento constante

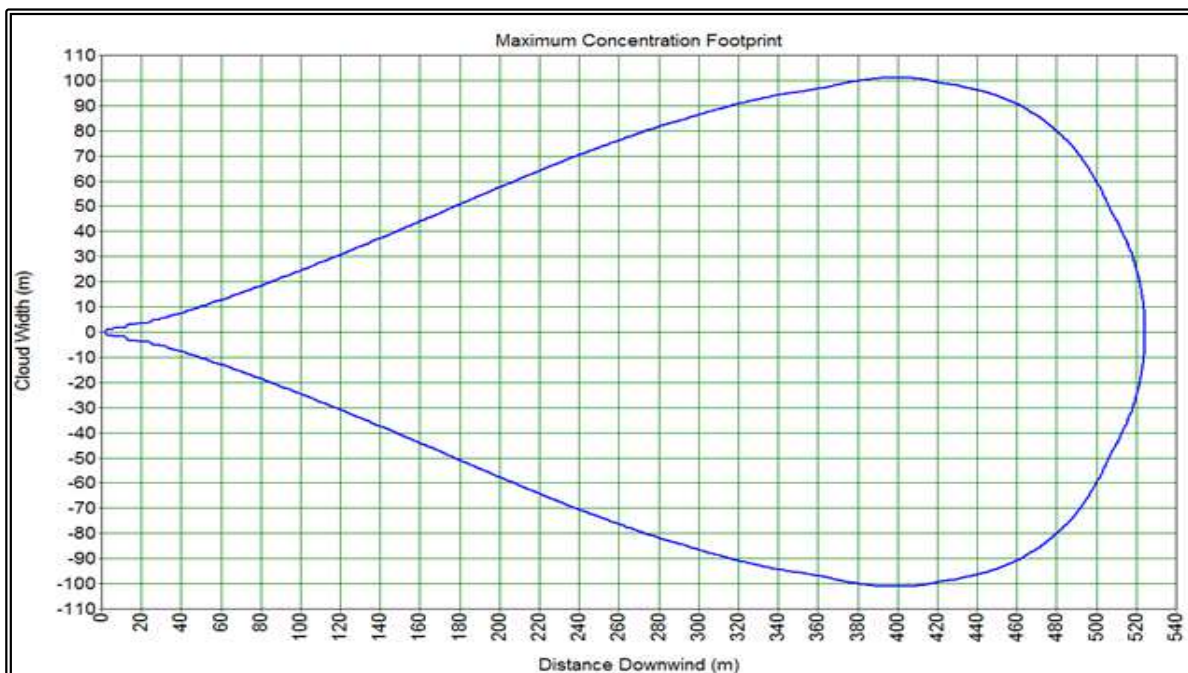
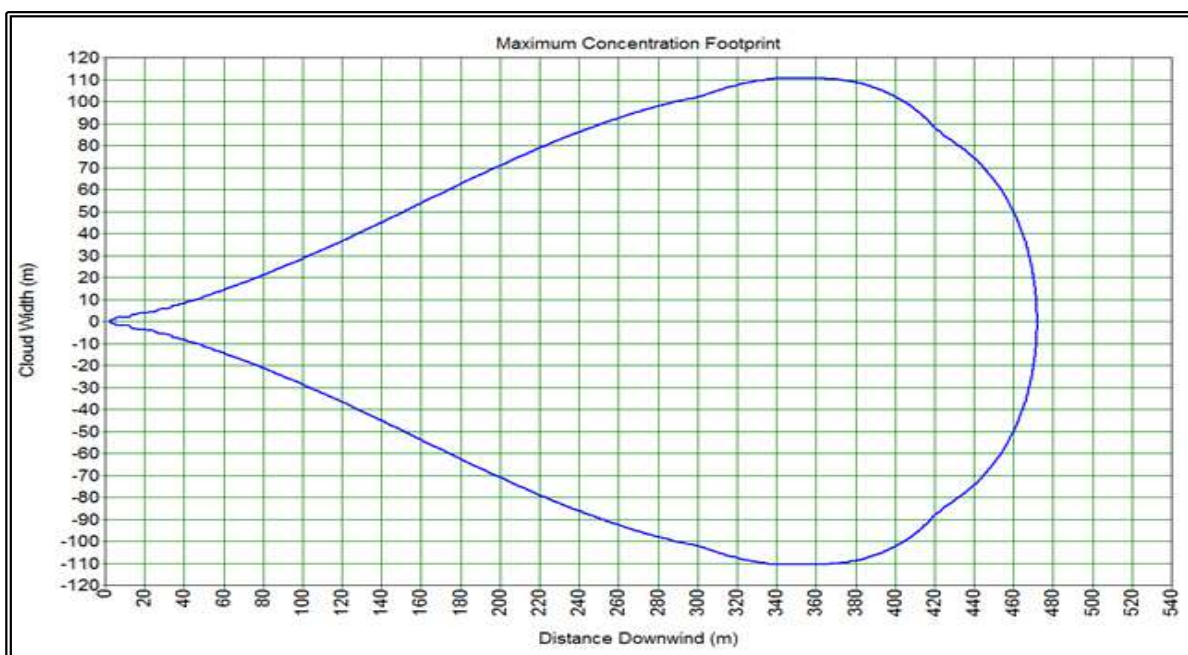


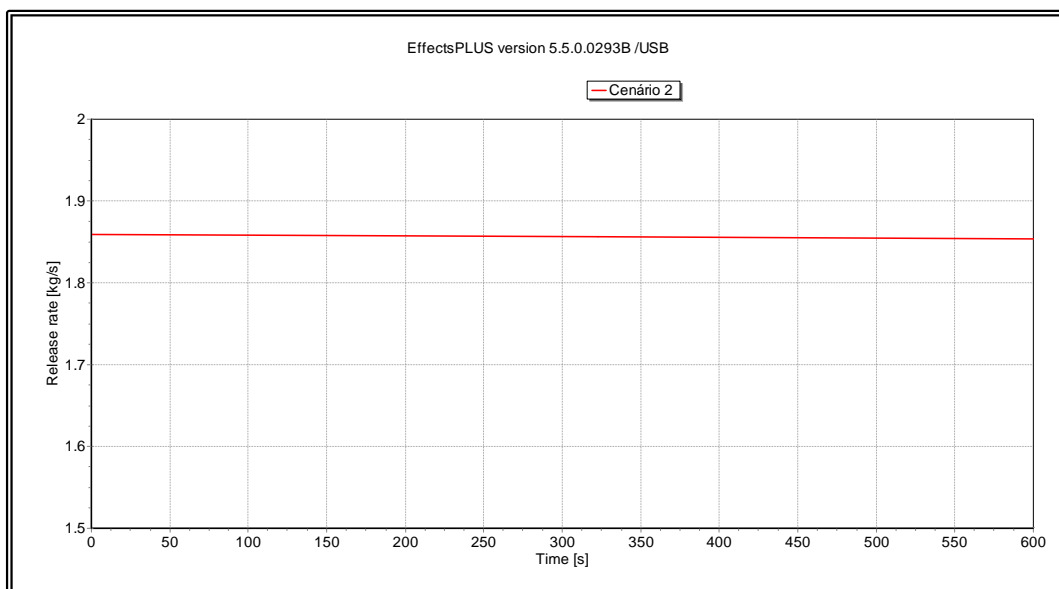
Figura 48 - Concentração com perfil de vento exponencial



2) Vazões mássicas nos softwares

A vazão no Effects para o Cenário 2 está apresentada na Figura 49.

Figura 49 - Vazão no Effects para o cenário 2.



A vazão no ALOHA para o Cenário 2 está apresentada na Figura 50, qual seja, 111 kg/min.

Figura 50 - Vazão no ALOHA para o cenário 2.

