UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO

Vanessa Panasco da Silva

AVALIAÇÃO DA DISPERSÃO DE GASES DE COMBUSTÃO EMITIDOS POR SISTEMAS DE TOCHA DE REFINARIAS DE PETRÓLEO

Orientadores:
Profº Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.
Profº Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Rio de Janeiro
2013

Vanessa Panasco da Silva

AVALIAÇÃO DA DISPERSÃO DE GASES DE COMBUSTÃO EMITIDOS POR SISTEMAS DE TOCHA DE REFINARIAS DE PETRÓLEO

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro como parte integrante dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (M Sc).

Orientadores:
Profº Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.
Profº Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Rio de Janeiro
2013

Silva, Vanessa Panasco da.
Avaliação da dispersão de gases de combustão emitidos por sistemas de tocha de refinarias de petróleo / Vanessa Panasco da Silva - 2013.
f.221: il., 30 cm
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Rio de Janeiro, 2013.
Orientador(es): Ricardo de Andrade Medronho e Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva.
1. Dispersão gasosa. 2. *Flare*. 3. Fluidodinâmica computacional. 4. Poluição Ambiental (Pós-Graduação – UFRJ/EQ).
I. Medronho, Ricardo de Andrade e Silva, Luiz Fernando Lopes Rodrigues II. Universidade Federal do Rio de Janeiro. Escola de Química III. Avaliação da dispersão de gases de combustão emitidos por sistemas de tocha de refinarias de petróleo.

Vanessa Panasco da Silva

AVALIAÇÃO DA DISPERSÃO DE GASES DE COMBUSTÃO EMITIDOS POR SISTEMAS DE TOCHA DE REFINARIAS DE PETRÓLEO

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro como parte integrante dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (M Sc).

Orientada por:

_____

Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.
(Presidente da Banca)

_____

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Aprovada por:

_____

Carlos André Vaz Junior, D.Sc.

_____

Tânia Suaiden Klein, Ph.D.

_____

Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e Melo, D.Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil
Setembro de 2013

“Comece fazendo o que é necessário, depois o que é possível, e de repente você estará fazendo o impossível.”

São Francisco de Assis

AGRADECIMENTOS

A Deus, pela oportunidade de conhecer e conviver com pessoas maravilhosas, pela sabedoria adquirida, pelo amor, esperança e apoio incondicional em todos os momentos. A bússola que me guiou à conclusão deste trabalho.

Ao meu pai, João, pela eterna confiança, apoio, orgulho e ensinamentos de vida. Quem me ensinou a nunca desistir quando encontrar um obstáculo, a lutar e nunca cruzar os braços se não obtiver sucesso em um objetivo, pois até o maior homem do mundo morreu de braços abertos. Minha força para alcançar esta conquista. Pai, obrigada pelo proveito de todos os anos que passamos juntos. Saudades eternas.

À minha mãe, Conceição, meu alicerce, meu escudo, meu almejado reflexo no espelho, minha maior riqueza. Todo amor, carinho, cuidado, dedicação e ajuda, que me deu, foram meu impulso para chegar até aqui e ser o que hoje sou. Minha gratidão é para toda a vida.

À minha irmã, Viviane, pelo carinho, companhia, proteção e sempre acreditar em mim. Não foi à toa que nascemos juntas e por isso, quero continuar a partilhar todos os momentos com você.

Ao meu amor, Beethoven, pelo incansável auxílio, compreensão, e motivação que me permitiram iniciar esse desafio, e sem os quais não conseguiria concluir essa dissertação. Você me conquista cada dia mais e desejo que nosso amor seja maravilhoso e inabalável sempre.

À toda minha família (avós, tios, tias, primos e primas) por todo carinho, amor, atenção e confiança.

Amo todos vocês!

Aos amigos que ajudaram a trilhar essa caminhada, amigos da UFRJ, do LabCFD; em especial um grande amigo, João Victor, que acredito não ter encontrado por acaso e cuja ajuda foi de suma importância com a utilização do *software*.

Aos meus orientadores por aceitarem participar desse desafio comigo.

SILVA, Vanessa Panasco da. **Avaliação da dispersão de gases de combustão emitidos por sistemas de tocha de refinarias de petróleo.** Orientadores: Ricardo de Andrade Medronho e Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva. Dissertação (Programa de Pós-graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos) - Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2013.

RESUMO

Atualmente verifica-se que o controle da qualidade do ar está em foco, com padrões normativos cada vez mais restritivos no que concerne aos limites toleráveis de exposição humana a determinados poluentes. Neste contexto, o sistema de tocha ganha destaque por estar diretamente ligado à emissão de compostos gasosos para a atmosfera. Este sistema é o tradicional método de queima de compostos gasosos inflamáveis, tóxicos e corrosivos indesejáveis, oriundos do sistema de alívio de indústrias químicas e petroquímicas, transformando-os em compostos menos nocivos ao meio ambiente. De modo geral, os sistemas de tocha, seja em refinarias seja em plataformas de petróleo, são encarados como potenciais agentes agravantes do efeito estufa. Este trabalho visa a avaliar as possibilidades de impactos das emissões oriundas de *flares* de refinarias diretamente à saúde humana, ou seja, quantificando as concentrações de poluentes ao nível do solo tanto dentro como fora dos limites da refinaria, visto que estas são, em muitos casos, circundadas por populações urbanas e rurais. Para isto, foram estudadas diversas condições tanto de operação do *flare* como atmosféricas, visando identificar os cenários de maior criticidade no que se refere às concentrações dos principais poluentes presentes neste tipo de emissão ao nível do solo. Este trabalho contempla também o estudo da dispersão em casos de falha do sistema de ignição do *flare*, o que acarreta a liberação de hidrocarbonetos não queimados possibilitando a formação de nuvens inflamáveis. Foi utilizado um *software* de fluidodinâmica computacional para simular a dispersão atmosférica dos gases, visto que é uma ferramenta já consolidada neste tipo de aplicação. Os resultados deste estudo apontaram que, sob certas condições meteorológicas e de operação do *flare*, as concentrações de poluentes são potencializadas configurando-se risco à saúde humana, notadamente do ponto de vista toxicológico. No entanto, não foram verificados cenários que acarretaram formação de nuvem potencialmente explosiva em baixas altitudes.

Palavras-chave: Dispersão gasosa, *Flare*, Fluidodinâmica computacional, CFD

SILVA, Vanessa Panasco da. **Avaliation of Atmospheric Dispersion of Flare Relieved Gases in Petroleum Refineries.** Advisers: Ricardo de Andrade Medronho and Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva. Dissertation (Program of Posgraduation in Technology of Chemical and Biochemical Processes) - Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2013.

ABSTRACT

Recently, air quality control has been in focus, with normative standards more restrictive regarding the tolerable limits of human exposure to pollutants. In this context, flare system is highlighted since it is directly related to the emission of gaseous compounds to the atmosphere. This system is the traditional method of burning flammable, toxic and corrosive gaseous compounds, originated from the relief system of chemical and petrochemical industries, by making them into less harmful compounds to the environment. In general, flare system is seen as a potential aggravating agent of the greenhouse effect, in both refineries and oil platforms. This study aims to evaluate the potential impacts of emissions from refinery flares directly to human health, that is, quantifying the concentrations of pollutants at ground level both inside and outside the boundaries of the refinery, since these are, in many cases, surrounded by urban and rural populations. For this purpose, various atmospheric and operating flare conditions were studied in order to identify the most critical scenarios regarding the concentrations of main pollutants present in this type of emission at ground level. This work also includes the study of gas dispersion in case of failure of the ignition flare system, which causes the release of unburned hydrocarbons compounds allowing the formation of flammable clouds. Computational fluid dynamics software was used to simulate the dispersion of atmospheric gases, since it is a well-known tool for this application. The results of this study indicate that, under certain atmospheric and flare operation conditions, the concentrations of pollutants are enhanced by setting up risk to human health, especially in a toxicological perspective. However, scenarios that result in potentially explosive cloud formation at low altitudes have not been verified.

Keywords: Gas Dispersion, Flare, Computational fluid dynamics, CFD.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 1
1.1 Motivação 1
1.2 Objetivo 3
1.3 Estrutura do trabalho 4
2 SISTEMA DE TOCHA 5
2.1 Descrição do processo 5
2.2 Componentes do Sistema de *Flare* 7
2.2.1 Sistema de Ignição do *Flare* 7
2.2.2 Tipos de *flare* 8
2.2.2.1 Verticais (*Elevated*) 8
2.2.2.2 Horizontais 10
2.2.2.3 Enclausurados (*Enclosed*) 10
2.2.2.4 *Single point flare* 11
2.2.2.5 *Multi-point flares* 11
2.2.2.6 Sistemas combinados 12
2.3 Projeto de Tochas 13
2.3.1 Distância segura contra o risco de ignição 15
2.3.2 Altura do *flare* 15
2.4 Teoria de combustão 19
2.5 Impactos ao meio ambiente e à saúde 20
2.5.1 Emissão de Óxidos de Enxofre 20
2.5.2 Emissão de Óxidos de Nitrogênio 22
2.5.3 Toxicidade das substâncias químicas 22
2.5.4 Efeito Estufa e Aquecimento Global 25
2.5.5 Qualidade do ar 27
3 MODELAGEM MATEMÁTICA DA DISPERSÃO GASOSA 30
3.1 Modelos de fonte 30
3.2 Modelos de dispersão 33
3.3 Fluidodinâmica computacional (CFD) 46
3.3.1 Malha computacional 48
3.3.2 Método de discretização 51
3.3.3 Modelagem matemática 51
3.3.4 Modelos de turbulência 53
3.4 Análise de dispersão de gases 58
3.4.1 Modelos gaussianos 58

3.4.2 CFD 60
3.4.3 Inversão térmica 67
4 MATERIAIS E MÉTODOS 73
4.1 *Software* e *Hardware* 73
4.2 Estudo de caso 73
4.3 Características da fonte de emissão 73
4.4 Definição das condições atmosféricas 76
4.5 Coeficientes de difusividade 79
4.6 Parâmetros e Condições de contorno da simulação 81
4.7 Geometria e Malha 82
4.8 Teste de malha 84
4.9 Considerações sobre Inversão térmica 89
4.10 Considerações sobre falha da chama 90
4.11 Especificação das simulações realizadas 91
4.12 Parâmetros para a análise dos resultados 93
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO 94
5.1 Caso 1 94
5.2 Caso 2 96
5.3 Caso 3 99
5.4 Caso 4 101
5.5 Caso 5 102
5.6 Caso 6 105
5.7 Caso 7 110
5.8 Caso 8 113
5.9 Caso 9 116
5.10 Caso 10 119
5.11 Caso 11 122
5.12 Caso 12 125
5.13 Caso 13 128
5.14 Caso 14 131
5.15 Caso 15 133
5.16 Caso 16 135
5.17 Caso 17 137
5.18 Caso 18 139
5.19 Caso 19 142
5.20 Caso 20 144
5.21 Caso 21 147
5.22 Caso 22 149

5.23 Caso 23 151
5.24 Caso 24 153
5.25 Caso 25 155
5.26 Caso 26 157
5.27 Caso 27 160
5.28 Caso 28 162
5.29 Caso 29 166
5.30 Caso 30 169
5.31 Caso 31 172
5.32 Caso 32 175
5.33 Caso 33 178
6 CONCLUSÕES 182
7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 185

LISTAS DE SIGLAS, ABREVIATURAS, SÍMBOLOS

LETRAS LATINAS

A= área do orifício;
C = concentração;
$\langle C \rangle$ = concentração média;
d = diâmetro do tubo;
D = distância mínima entre o epicentro da chama e o objeto em questão;
dF= termo de perda líquida de atrito;
dP = diferencial de pressão;
dz = diferencial de coordenada vertical;
Ec = energia cinética média;
f= fator de fricção de Fanning;
Fi = fração do calor irradiado;
g= aceleração da gravidade;
G = fluxo de massa;
g_c= constante gravitacional;
h= altura da tocha;
ΔH_r = correção da altura de vazamento;
I = intensidade do calor radiante;
k = energia cinética turbulenta;
K_{AB} = coeficiente de difusividade;
l= escala de comprimento;
L = comprimento do tubo;
M = massa molar;
m= vazão mássica;
P = pressão (subíndice 0 refere-se ao ponto inicial);
$\Delta \mathrm{p}$ = forças de pressão;
Q = calor liberado;
$Q*m$ = quantidade fixa de matéria;
R_g= constante de gases ideais;
T = temperatura (subíndice 0 refere-se ao ponto inicial, 1 ao ponto final e b ao ponto de ebulição);
t = tempo;
u= velocidade média instantânea do fluido;
u_j = velocidade do vento (subíndice j refere-se a resultante das direções x, y e z);
$\langle u_j \rangle$ = velocidade média;

$\sum V$ = volume de difusão = soma dos volumes atômicos de todos os elementos de cada molécula;
x = coordenada de um ponto do domínio;
y = coordenada de um ponto do domínio;
z = coordenada de um ponto do domínio;
W_s= trabalho de eixo;

LETRAS GREGAS

α= fator de correção de velocidade;
$\bar{\beta}$= coeficiente de expansão volumétrico;
$\gamma = C_p/C_v$ a razão entre as capacidades caloríficas;
Δ= estado final – estado inicial;
δ = fração do calor irradiado transmitido através da atmosfera;
ε = taxa de dissipação da energia cinética;
μ_t = viscosidade turbulenta;
ρ = densidade do fluido (subíndice f refere-se ao líquido);
σ = forças viscosas;
$\boldsymbol{\tau}$ = tensão cisalhante;
ϑ= escala de velocidade.

SIGLAS E ABREVIATURAS

ACGIH = *American Conference of Governmental Industrial Hygienists*;
CCPS = *Center for Chemical Process Safety;*
CCS = *Carbon Capture and Storage;*
CFD = *Computacional fluid dynamics;*
CLC = Camada Limite Convectiva;
CLN = Camada Limite Neutramente Especificada;
CMAA = Concentração média aritmética anual;
CMGA = Concentração média geométrica anual;
CONAMA = Conselho Nacional do Meio Ambiente;
COP-18 = 18ª Conferência das Nações Unidas sobre Mudanças Climáticas;
EI = Inventário de emissões;
EIA = Estudo de Impacto Ambiental;
EPA = *Environmental Protection Agency*;
GEE = gás de efeito estufa;
HSL = *Health & Safe Laboratory*;

IBAMA = Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis;
IPCC = *Intergovernmental Panel on Climate Change*;
LES = *Large Eddy Simulation*;
LFL = Limite inferior de inflamabilidade;
MP = Material particulado;
NR = Norma Regulamentadora;
OSHA = *Occupational Safety and Health Administration of the United States*;
PDR = *Porosity/Distributed Resistence*;
PEL = *Permissible exposure level*;
PRONAR = Programa Nacional de Controle da Poluição do Ar;
RIMA = Relatório de Impacto no Meio Ambiente;
RMP = *Risk Management Plan*;
RMS = Raiz do erro quadrático;
TLV = *Threshold limit value*;
TLV-TWA = *Time-Weight Average*;
UDAV = Unidade de Destilação Atmosférica e a Vácuo;
UFL = Limite superior de inflamabilidade;

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Fluxograma esquemático do sistema de tocha (Adaptado de Milton Beychok, 2012 - http://en.citizendium.org/wiki/Flare_stack) 6
Figura 2: (a) Autoportante (*Self-supported*), (b) Estaiado (*Guyed*) e (c) Estrutura de apoio (*Derrick supported*) (API STD 537, 2003 e http://www.flareindustries.com/products) 9
Figura 3: *Flare* horizontal (ANSI/API ST 537, 2008) 10
Figura 4: *Flare* enclausurado – *Enclosed Flare* (Adaptado de API STD 537, 2003 e http://www.flareindustries.com/products) 10
Figura 5: Típico *Single point flare* na vertical (a) e na horizontal (b) (Baukal e Schwartz, 2001) 11
Figura 6: Típico *muti-point flare* próximo ao solo (a) ou em nível elevado (b) (Baukal e Schwartz, 2001 e http://www.flareindustries.com/products) 12
Figura 7: Sistema combinado *enclosed flare* com *flare* vertical (a) e sistema combinado *single point flare* com *multi-point flare* (b) (Baukal e Schwartz, 2001) 13
Figura 8: Referências dimensionais para projeto de *flare* (Modificada da ANSI/API STD 521, 2008) 18
Figura 9: Atmosfera estável (Detrie, 1969 *apud* Lisboa,2007) 35
Figura 10: Atmosfera instável (Detrie, 1969 *apud* Lisboa,2007) 35
Figura 11: Atmosfera neutra (Detrie, 1969 *apud* Lisboa,2007) 36
Figura 12: Condições de Dispersão Atmosférica (Turner, 2002 *apud* Soares, 2006) 36
Figura 13: Gradiente de temperatura normal da atmosfera e Inversão térmica (http://ambiente.hsw.uol.com.br/inversao-termica.htm) 37
Figura 14: Distribuição de concentração da nuvem devido à altura da fonte. Pluma formada por vazamento contínuo (Adaptada de Crowl e Louvar, 2002). 38
Figura 15: Influência da turbulência e empuxo na dispersão (Adaptada de Crowl e Louvar, 2002). 39
Figura 16: *Puff* formado por vazamento instantâneo (Adaptada de Crowl e Louvar, 2002) 40
Figura 17: Fonte contínua em estado estacionário com vento. Coordenada x é a direção do vento (Adaptada de Crowl and Louvar, 2002). 41
Figura 18: Pluma liberada por chaminé demonstrando sua elevação devido à alta temperatura dos gases (Adaptada de Crowl e Louvar, 2002) 44
Figura 19: Distribuições Normais de Concentração nos Eixos z e y, Ortogonais ao eixo de Propagação da Pluma (x) em Modelos de Pluma Gaussiana (Lisboa, 2007). 45
Figura 20: Etapas de solução em fluidodinâmica computacional. 47

Figura 21: Formas geométricas mais comumente utilizadas na geração de malhas em CFD (Pfluck, 2010) 48
Figura 22: Exemplos de refinamento da malha próximo às paredes e em determinado ponto de controle (ANSYS Help 11.0, 2007) 49
Figura 23: Malha estruturada (a) e malha não-estruturada (b) (Pfluck, 2010). 50
Figura 24: (a) Escoamento turbulento permanente no qual uz não depende do tempo e (b) no qual uz depende do tempo. (Bird *et al.*,2004) 54
Figura 25: Esquema com os parâmetros usados na caracterização da pluma e da camada de inversão térmica (Zhang e Ghoniem, 1994). 69
Figura 26: Condição fumegante (*fumigation*) (Lisboa, 2007) 72
Figura 27: Condição tubular (*fanning*) (Lisboa, 2007) 72
Figura 28: Perfil de velocidade de vento por classe de estabilidade atmosférica 78
Figura 29: Malha 2D com 800m de altura 83
Figura 30: Malha 2D com 500m de altura 83
Figura 31: Perfil de pluma e distribuição dos elementos da Malha 1 85
Figura 32: Perfil de pluma e distribuição dos elementos da Malha 2 85
Figura 33: Perfil de pluma e distribuição dos elementos da Malha 3 86
Figura 34: Perfil de pluma e distribuição dos elementos da Malha 4 86
Figura 35: Perfil de pluma e distribuição dos elementos da Malha 5 87
Figura 36: Contorno da pluma para as cinco malhas estudadas. 88
Figura 37: Perfil de velocidade no Caso 1, com o *flare* inteiro. 94
Figura 38: Perfil de concentração da pluma no Caso 1, com o *flare* inteiro. 95
Figura 39: Perfil de velocidades do Caso 2 com indicação do topo do *flare*. 95
Figura 40: Plano de velocidades do Caso 2. 96
Figura 41: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a); gráfico do perfil de velocidades na entrada (b); e gráfico do perfil de velocidades na saída (c) – Caso 2. 97
Figura 42: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 2. 98
Figura 43: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 2. 98
Figura 44: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 2. 99
Figura 45: Perfil de velocidades do vento do Caso 3. 100
Figura 46: Perfil de velocidades do vento do Caso 4. 101
Figura 47: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a); gráfico do perfil de velocidades na entrada (b); e gráfico do perfil de velocidades na saída (c) – Caso 5. 103
Figura 48: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 5. 103
Figura 49: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 5. 104
Figura 50: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 5. 104

Figura 51: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a); gráfico do perfil de velocidades na entrada (b); e gráfico do perfil de velocidades na saída (c) – Caso 6. 106
Figura 52: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 6. 107
Figura 53: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 6. 107
Figura 54: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 6. 108
Figura 55: Detalhe do perfil de velocidade no Caso 6. 109
Figura 56: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a); gráfico do perfil de velocidades na entrada (b); e gráfico do perfil de velocidades na saída (c) – Caso 7. 111
Figura 57: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 7. 111
Figura 58: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 7. 112
Figura 59: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 7. 112
Figura 60: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a); gráfico do perfil de velocidades na entrada (b); e gráfico do perfil de velocidades na saída (c) – Caso 8. 114
Figura 61: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 8. 114
Figura 62: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 8. 115
Figura 63: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 8. 115
Figura 64: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a) e gráfico do perfil de velocidade na entrada (b) – Caso 9. 117
Figura 65: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 9. 117
Figura 66: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 9. 118
Figura 67: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 9. 118
Figura 68: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a) e gráfico do perfil de velocidade na entrada (b) – Caso 10. 120
Figura 69: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 10. 120
Figura 70: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 10. 121
Figura 71: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 10. 121
Figura 72: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a), gráfico do perfil de velocidade na entrada (b) e gráfico do perfil de velocidade na saída (c) – Caso 11. 123
Figura 73: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 11. 124
Figura 74: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 11. 124
Figura 75: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 11. 125
Figura 76: Perfil de velocidades do Caso 12. 126
Figura 77: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 12. 127
Figura 78: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 12. 127

Figura 79: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 12. 128
Figura 80: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 13. 129
Figura 81: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 13. 130
Figura 82: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 13. 130
Figura 83: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 14. 131
Figura 84: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 14. 132
Figura 85: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 14. 132
Figura 86: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 15. 133
Figura 87: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 15. 134
Figura 88: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 15. 134
Figura 89: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 16. 135
Figura 90: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 16. 136
Figura 91: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 16. 136
Figura 92: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 17. 137
Figura 93: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 17. 138
Figura 94: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 17. 138
Figura 95: Perfil de velocidades do caso 18 139
Figura 96: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 18. 140
Figura 97: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 18. 141
Figura 98: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 18. 141
Figura 99: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 19. 142
Figura 100: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 19. 143
Figura 101: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 19. 143
Figura 102: Perfil de velocidades do Caso 20. 145
Figura 103: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 20. 145
Figura 104: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 20. 146
Figura 105: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 20. 146
Figura 106: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 21. 147
Figura 107: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 21. 148
Figura 108: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 21. 148
Figura 109: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 22. 149
Figura 110: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 22. 150
Figura 111: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 22. 150
Figura 112: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 23. 151
Figura 113: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 23. 152
Figura 114: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 23. 152
Figura 115: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 24. 153
Figura 116: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 24. 154

Figura 117: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 24. 154
Figura 118: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 25. 156
Figura 119: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 25. 156
Figura 120: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 25. 157
Figura 121: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 26. 158
Figura 122: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 26. 159
Figura 123: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 26. 159
Figura 124: Pefil de velocidades na saída do domínio no Caso 27. 160
Figura 125: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 27. 161
Figura 126: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 27. 161
Figura 127: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 27. 162
Figura 128: Perfil de concentração do CH_4 no Caso 28. 163
Figura 129: Perfil de concentração do C_3H_8 no Caso 28. 163
Figura 130: Perfil de concentração do C_7H_{16} no Caso 28. 164
Figura 131: Perfil de concentração do NH_3 no Caso 28. 165
Figura 132: Perfil de concentração do H_2S no Caso 28. 165
Figura 133: Perfil de concentração do CH_4 no Caso 29. 166
Figura 134: Perfil de concentração do C_3H_8 no Caso 29. 167
Figura 135: Perfil de concentração do C_7H_{16} no Caso 29. 167
Figura 136: Perfil de concentração do NH_3 no Caso 29. 168
Figura 137: Perfil de concentração do H_2S no Caso 29. 168
Figura 138: Perfil de concentração do CH_4 no Caso 30. 170
Figura 139: Perfil de concentração do C_3H_8 no Caso 30. 170
Figura 140: Perfil de concentração do C_7H_{16} no Caso 30. 171
Figura 141: Perfil de concentração do NH_3 no Caso 30. 171
Figura 142: Perfil de concentração do H_2S no Caso 30. 172
Figura 143: Perfil de concentração do CH_4 no Caso 31. 173
Figura 144: Perfil de concentração do C_3H_8 no Caso 31. 173
Figura 145: Perfil de concentração do C_7H_{16} no Caso 31. 174
Figura 146: Perfil de concentração do NH_3 no Caso 31. 174
Figura 147: Perfil de concentração do H_2S no Caso 31. 175
Figura 148: Perfil de concentração do CH_4 no Caso 32. 176
Figura 149: Perfil de concentração do C_3H_8 no Caso 32. 176
Figura 150: Perfil de concentração do C_7H_{16} no Caso 32. 177
Figura 151: Perfil de concentração do NH_3 no Caso 32. 177
Figura 152: Perfil de concentração do H_2S no Caso 32. 178
Figura 153: Perfil de concentração do CH_4 no Caso 33. 179
Figura 154: Perfil de concentração do C_3H_8 no Caso 33. 179

Figura 155: Perfil de concentração do C_7H_{16} no Caso 33. 180
Figura 156: Perfil de concentração do NH_3 no Caso 33. 180
Figura 157: Perfil de concentração do H_2S no Caso 33. 181

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Níveis de radiação térmica recomendados à exposição pessoal (Modificada da ANSI/API STD 521, 2008)..... 17
Tabela 2: Grau de toxicidade do SO_2 em seres humanos e vegetais (Adaptado de Serfaty, 2010). 20
Tabela 3: TLVs e PELs para alguns compostos químicos (Modificada de Crowl e Louvar, 2002 e ABHO, 2008). 23
Tabela 4: Tabela de limites de tolerância (Modificada da NR-15 da Portaria n. 3214 de 8/6/1978) 24
Tabela 5: Valores Padrões de Material Particulado para Qualidade do Ar Ambiente (Serfaty, 2010) 27
Tabela 6: Padrões nacionais de qualidade do ar (Valores extraídos da Resolução CONAMA Nº 03 de 1990) 29
Tabela 7: Classes de estabilidade atmosférica de Pasquill (Turner, 1970 *apud* Soares, 2006) 34
Tabela 8: Parâmetros do gás a ser queimado 74
Tabela 9: Composição e propriedades do gás a ser queimado 74
Tabela 10: Características do *flare* 75
Tabela 11: Composição e propriedades do gás de combustão 76
Tabela 12: Dados do Ar Ambiente 76
Tabela 13: Parâmetros do Perfil Vertical de Velocidade do vento (EPA, 1995 *apud* Soares, 2006). 77
Tabela 14: Condições do ambiente adotadas nas simulações 78
Tabela 15: Incrementos de volumes de difusão atômico ou estrutural (Wesselingh e Krishna, 1990) 79
Tabela 16: Volumes de difusão para moléculas simples (Wesselingh e Krishna, 1990) 79
Tabela 17: Difusividade dos componentes do gás de queima no ar ambiente 80
Tabela 18: Difusividade dos gases a serem queimados no ar ambiente 80
Tabela 19: Parâmetros das simulações 81
Tabela 20: Condições de contorno das simulações 81
Tabela 21: Dados da malha 2D com 800 metros de altura 82
Tabela 22: Dados da malha 2D com 500 metros de altura 83
Tabela 23: Caracterização do Teste de malha 84
Tabela 24: Especificação dos casos simulados 91
Tabela 25: Limites de inflamabilidade das substâncias presentes no gás de queima (NFPA 497, 2012). 93

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

Já faz algum tempo que a comunidade científica tem se preocupado com a qualidade do ar e vem investindo esforços para identificar as fontes poluidoras da atmosfera e estudar o comportamento desses poluentes após suas emissões a fim de prever e minimizar os impactos ao meio ambiente e à sociedade. Desde o século passado, verificam-se elevados números de doenças respiratórias, cardiovasculares e óbitos relacionados à poluição atmosférica, além das mudanças climáticas ao redor do mundo, provocando o aumento de fenômenos metereológicos perigosos e indesejáveis (Menezes, 2006 e Alves e Aciole, 2012).

No âmbito de condições climáticas desfavoráveis estão as inversões térmicas, que impedem a dispersão dos poluentes acarretando o acúmulo dos mesmos na atmosfera e o decréscimo da qualidade do ar ambiente. Vale ressaltar também o aquecimento global (aumento da temperatura média global do ar e dos oceanos), possivelmente causado pelo aumento da emissão dos gases de efeito estufa na atmosfera, que vem levando ao degelo das calotas polares e à elevação do nível do mar. Tufões, furacões, maremotos e enchentes podem ocorrer com mais intensidade, e se a temperatura dos mares continuar se elevando, pode ocorrer um desvio de curso de correntes marítimas, ocasionando a extinção de vários animais marinhos e diminuição da quantidade de peixes.

Na década de 70, os Estados Unidos estabeleceram padrões de qualidade do ar e criaram a Agência de Proteção Ambiental (EPA) visando a pesquisa, o monitoramento, o estabelecimento de normas e a promoção de ações para garantir o controle da qualidade do ar e a proteção ambiental (EPA, 2013). Desde então, diversos países criaram suas agências ambientais e legislações pertinentes; e metas foram acordadas entre nações do mundo inteiro para a redução da emissão de gases-estufa, como o Protocolo de Kyoto. Na década de 80, o Brasil criou o Conselho Nacional de Meio Ambiente (CONAMA), com a responsabilidade de estabelecer padrões e métodos ambientais e estabeleceu limites máximos de emissão de poluentes atmosféricos, conforme o Programa Nacional de Controle da Poluição do Ar (PRONAR).

O desenvolvimento econômico mundial depende fortemente do petróleo, devido a grande variedade de seus derivados, em especial, dos combustíveis. Além disso, o petróleo constitui-se como importante matéria-prima para as indústrias de base como a petroquímica (Fleck, 2008). Os produtos de petróleo e gás natural são produzidos para atender às necessidades energéticas da sociedade, e aproximadamente 50%

dessa energia é gerada a partir da oxidação do carbono contido nos hidrocarbonetos resultando na formação de dióxido de carbono. Por tratar-se da própria essência da combustão, não é possível alterá-la com o progresso tecnológico (Bret-Rouzaut e Favennec, 2011). A indústria do petróleo está profundamente envolvida nas questões ambientais, já que é vista pela sociedade como uma das principais fontes perigosas (probabilidade de incêndio e explosão) e poluidoras do meio ambiente (com a emissão de substâncias tóxicas, inflamáveis e gases de efeito estufa).

Neste contexto, o sistema de tocha (*flare*) ganha destaque por estar diretamente ligado à emissão de compostos gasosos para a atmosfera. Este sistema é o tradicional método de queima de compostos gasosos inflamáveis, tóxicos e corrosivos indesejáveis, oriundos do sistema de alívio de indústrias químicas, refinarias de petróleo e petroquímicas, transformando-os em compostos menos nocivos ao meio ambiente (Brzustowiski, 1976).

De modo geral, verifica-se que o processo de industrialização e determinação da localidade onde indústrias como refinarias de petróleo serão instaladas está priomordialmente vinculado a questões políticas e financeiras, sendo muitas vezes negligenciados os impactos à população e ao meio ambiente vizinhos. Mesmo nos casos em que essas indústrias são construídas em locais inabitados, há que se considerar a futura formação de centros urbanos ao redor das mesmas.

Para um controle adequado da qualidade do ar na área industrial e redondezas é necessário um monitoramento contínuo das emissões e das concentrações de poluentes na atmosfera. No entanto, este monitoramento requer alto custo e deve ser feito em pontos estratégicos. Porém, com as frequentes mudanças na direção e velocidade dos ventos ao longo do dia e estação do ano e ocorrência de fenômenos climáticos adversos, é possível chegar a conclusões incorretas sobre a qualidade do ar ambiente. Portanto, o uso de modelagem matemática para predição do comportamento e concentração dos gases emitidos na atmosfera é de grande importância para o controle da poluição atmosférica (Menezes, 2006).

A simulação de dispersão atmosférica gasosa é um processo complexo sendo de difícil reprodução e modelagem pela mecânica dos fluidos, não sendo encontrada uma teoria completa que descreva a relação entre o comportamento de concentrações atmosféricas de poluentes gasosos e fatores e processos de natureza meteorológica (Taiao, 2004).

Uma modelagem deste fenômeno com grau satisfatório de precisão é fundamental para o controle da qualidade do ar, uma vez que permite prever as emissões dos poluentes e os efeitos gerados no ambiente e assim enquadrá-los às normas vigentes de qualidade do ar. É possível também, determinar a altura adequada da chaminé e elaborar estratégias para o controle e mitigação de emissões

atmosféricas e, inclusive, substituir o monitoramento contínuo por meio da simulação computacional otimizando recursos e tempo. Para o caso de regiões virgens, estes modelos são de extrema importância para antever os impactos ambientais.

1.2 Objetivo

Este trabalho visa o estudo da dispersão de gases de combustão emitidos por tochas de refinarias de petróleo. Nele são avaliados os possíveis impactos à qualidade do ar dentro e no entorno da refinaria, tendo em vista os limites permissíveis de concentração de gases poluentes (NOx, SOx, CO_2, entre outros), bem como o risco de explosão devido à falha do *flare* com a consequente emissão de nuvem de hidrocarbonetos não queimados, possivelmente inflamável, quando em contato com fonte de ignição. Uma refinaria de petróleo contém diversas fontes de ignição, como equipamentos a altas temperaturas capazes de atingir as temperaturas de autoignição desses hidrocarbonetos, além de várias outras potenciais fontes de ignição.

Outro enfoque deste estudo está na avaliação do comportamento da pluma mediante diferentes condições atmosféricas, relacionadas com as classes de estabilidade de Pasquill (Classes A, B, C, D, E e F).

Neste contexto foram avaliados os seguintes cenários:

- Emissão de gases queimados no *flare* em todas as classes de estabilidade com velocidades de vento variáveis de 3 a 10 m/s, conforme adequação à classe de estabilidade.

- Emissão de gases não queimados, considerando uma falha na chama do *flare*, em condições atmosféricas extremas (vento forte e fraco conforme classe de estabilidade).

- Para ambos os casos (condições normais de operação e falha de chama) estudou-se a ocorrência de inversão térmica, fenômeno usual na atmosfera, que impede a dispersão dos gases.

Conforme a ANSI/API STD 521 (2008), são considerados dois casos de velocidade de escoamento para o dimensionamento de *flare*: um pico de velocidade equivalente ao número de Mach (Ma) igual a 0,5, por um curto período ou um fluxo pouco frequente; e a velocidade considerada normal de operação (condição frequente) com Ma igual a 0,2. Posto isto, consideram-se também neste estudo as duas possíveis taxas de emissão correspondentes a essas velocidades.

1.3 Estrutura do trabalho

No Capítulo 2 é apresentado o contexto do sistema de tocha com a descrição do processo desde a sua interligação com o alívio das unidades da refinaria até a emissão dos gases para a atmosfera, após a combustão. Este capítulo apresenta também os diversos tipos de tochas e os principais parâmetros para projeto e seleção do sistema. Tendo em vista que os gases de combustão são emitidos para a atmosfera, ao fim deste capítulo são abordados os limites admissíveis de concentração de poluentes na atmosfera e legislação pertinente à qualidade do ar, bem como os possíveis impactos ao meio ambiente e à saúde humana.

O Capítulo 3 aborda primeiramente os modelos de caracterização das fontes de emissão (instantânea ou contínua) e a seguir os modelos matemáticos para a predição do comportamento da dispersão dos gases emitidos. Neste capítulo são apresentadas comparações entre as soluções analíticas - através de modelos como os gaussianos - e as numéricas - com o uso de fluidodinâmica computacional (CFD). Com o auxílio de vasta revisão bibliográfica comprova-se que o modelo de CFD é mais eficiente e apropriado para o estudo em questão.

No Capítulo 4 são apresentados os diversos cenários para as simulações da dispersão de gases emitidos por tochas de refinarias de petróleo. Foram estudados os impactos da dispersão em direção à refinaria e a uma montanha, incluindo as determinações de condições iniciais e de contorno para as simulações em *software* de fluidodinâmica computacional CFX da ANSYS, versão 13.1.

O Capítulo 5 apresenta os resultados das simulações e a discussão dos dados obtidos.

O Capítulo 6 aponta as conclusões do trabalho, assim como sugestões para futuros estudos.

2 SISTEMA DE TOCHA

O sistema de tocha é um componente crítico no que se refere à segurança do processo em uma refinaria de petróleo, indústria petroquímica e em instalações de produção *offshore*. Sua função primordial é descarregar e queimar de forma segura, confiável, eficiente e a um custo razoável, grandes quantidades de gases de hidrocarbonetos oriundos de sistemas de alívio de pressão das unidades de processo (Brzustowiski, 1976).

Com o advento de normas reguladoras da qualidade do ar, o sistema de tocha adquiriu uma importância adicional como método de controle ambiental, visto que muitos gases inflamáveis, tóxicos ou corrosivos que anteriormente poderiam ser descartados diretamente na atmosfera, passaram a ser obrigatoriamente queimados e convertidos em compostos menos nocivos ao meio-ambiente. Estimativas recentes sugerem que mais de 139 bilhões de metros cúbicos de gás são queimados anualmente em sistemas de tocha em todo o mundo, descarregando para a atmosfera aproximadamente 281 milhões de toneladas de CO_2 por ano (Johnson e Coderre, 2012).

2.1 Descrição do processo

Todas as unidades de processo de uma refinaria e, em alguns casos, os tanques de estocagem de produtos, são interligados ao sistema de tocha de modo a garantir uma rápida e segura eliminação dos gases hidrocarbonetos tanto em operação normal da refinaria quanto em situações de emergência ou de anormalidade do processo, tais como: em casos de falhas em equipamentos ou no sistema de controle de processo, falta de energia elétrica ou ocorrência de incêndio em algum ponto da unidade industrial (Yadav *et al.*, 2011 e Refining Processes Handbook, 2003).

A Figura 1 mostra um esquema típico de um sistema de tocha:

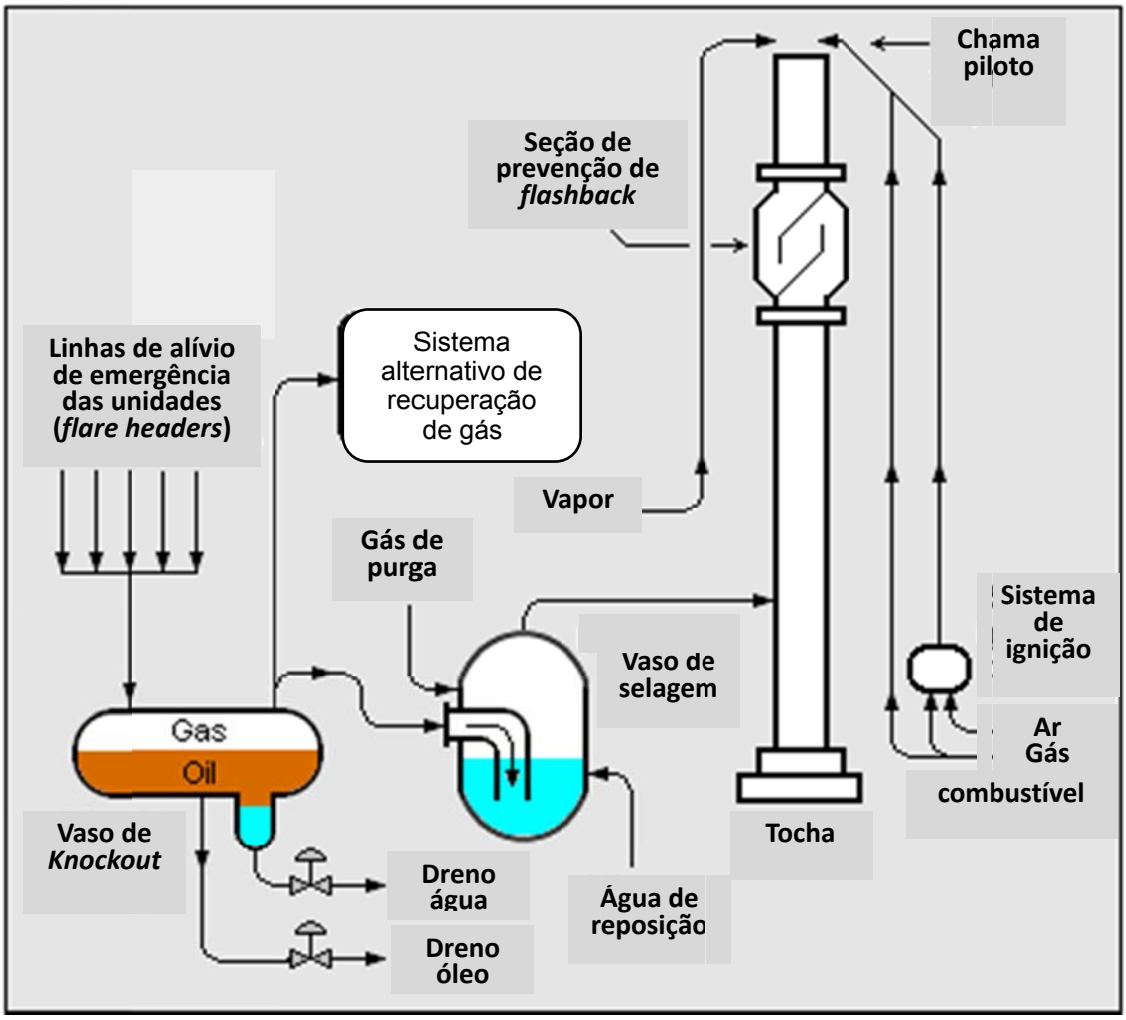


Figura 1: Fluxograma esquemático do sistema de tocha (Adaptado de Milton Beychok, 2012 - http://en.citizendium.org/wiki/Flare_stack)

Como mostrado na Figura 1, os gases e vapores provenientes das unidades de processo e/ou da estocagem de produtos são direcionados ao sistema de tocha, onde passam, primeiramente, pelo vaso separador líquido-gás (*knock-out drum*). Este equipamento tem a função de remover as gotículas de líquidos normalmente presentes nos vapores de hidrocarbonetos (ANSI/API STD 537, 2008). Além de diminuírem a eficiência da combustão, estas gotículas inflamáveis, quando em tamanhos superiores a 150 micra, devem ser retiradas antes que o gás atinja o topo do queimador de modo a evitar que elas sejam projetadas para fora da tocha e caiam como uma “chuva” sobre as áreas adjacentes ao sistema, constituindo-se em um risco à segurança da instalação. Em condições normais de operação, onde a vazão de gás queimado é pequena, apenas um vaso separador geralmente é suficiente para realizar a remoção de líquidos, porém, em situações de emergência onde grandes vazões de gases devem ser queimadas, um maior número de equipamentos

de separação se torna necessário (Refining Processes Handbook, 2003).

Após passarem pelos vasos separadores, os gases hidrocarbonetos são encaminhados pela tubulação principal do sistema de tocha (*flare header*) para o vaso de selagem com líquido, cujo objetivo é evitar a entrada de ar no sistema, o que provocaria a queima dos gases antes da sua chegada à zona de combustão da tocha e o consequente retorno da chama através das tubulações até as unidades de processo (*flashback*) (Yadav et al., 2012 e Ludwig, 2007).

De modo geral, os componentes típicos de um sistema de tocha industrial são:

- ✓ Vaso de *knock-out* para remover líquidos (óleo e/ou água) dos gases de alívio.
- ✓ Vaso de selagem para impedir a ocorrência de *flashback* da chama.
- ✓ Sistema alternativo de recuperação de gás para uso durante partidas e/ou paradas de plantas, bem como outras demandas. O gás recuperado é encaminhado para o sistema de gás combustível da planta industrial.
- ✓ É frequente a injeção de vapor para proporcionar uma força externa permitindo uma mistura eficiente do ar com o gás liberado, o que promove a queima sem fumaça. Consegue-se a chamada *smokeless combustion* ou queima sem fumaça com a utilização de ar, vapor, energia de pressão ou outros meios que criem turbulência na entrada de ar no fluxo de gás liberado. Essa queima elimina a fumaça visível sob faixa específica de fluxo.
- ✓ Sistema de ignição para queima contínua e estável.
- ✓ Tocha, incluindo uma seção de prevenção de *flashback* em sua parte superior.

2.2 Componentes do Sistema de *Flare*

2.2.1 Sistema de Ignição do *Flare*

A descarga de gases oriundos do processo pode acontecer a qualquer momento durante a operação da planta. Por isso, um sistema integrado de ignição se faz necessário de modo a iniciar imediatamente e manter a queima estável, qualquer que seja a vazão dos gases a serem queimados. Um sistema integrado de ignição inclui: um ou mais pilotos, o ignitor, o monitor e recursos para estabilizar a chama.

Em tese, todos os *flares* devem possuir uma chama piloto contínua para garantir a confiabilidade da queima. Isso é especialmente importante para tochas de refinarias, de plantas petroquímicas e de campos de produção de petróleo visto que a tocha não pode apagar até que a parada da planta seja completamente efetuada.

Além disso, deve-se considerar a imprevisibilidade dos eventos que demandem uma ignição imediata dos gases.

2.2.2 Tipos de *flare*

De acordo com Baukal e Schwartz (2001) o correto dimensionamento de um sistema de tocha deve levar em consideração diversos aspectos, dentre eles:

- ✓ a composição do gás a ser queimado (que varia, frequentemente, em uma grande faixa);
- ✓ a vazão a ser queimada (que varia entre a condição de purga do processo e a vazão máxima em caso de emergência);
- ✓ os queimadores do *flare* operam em uma condição de elevado excesso de ar em comparação com outros tipos queimadores;
- ✓ em condições de emergência são queimadas grandes vazões de hidrocarbonetos gerando uma chama que pode se estender por centenas de metros e uma enorme quantidade de energia térmica.

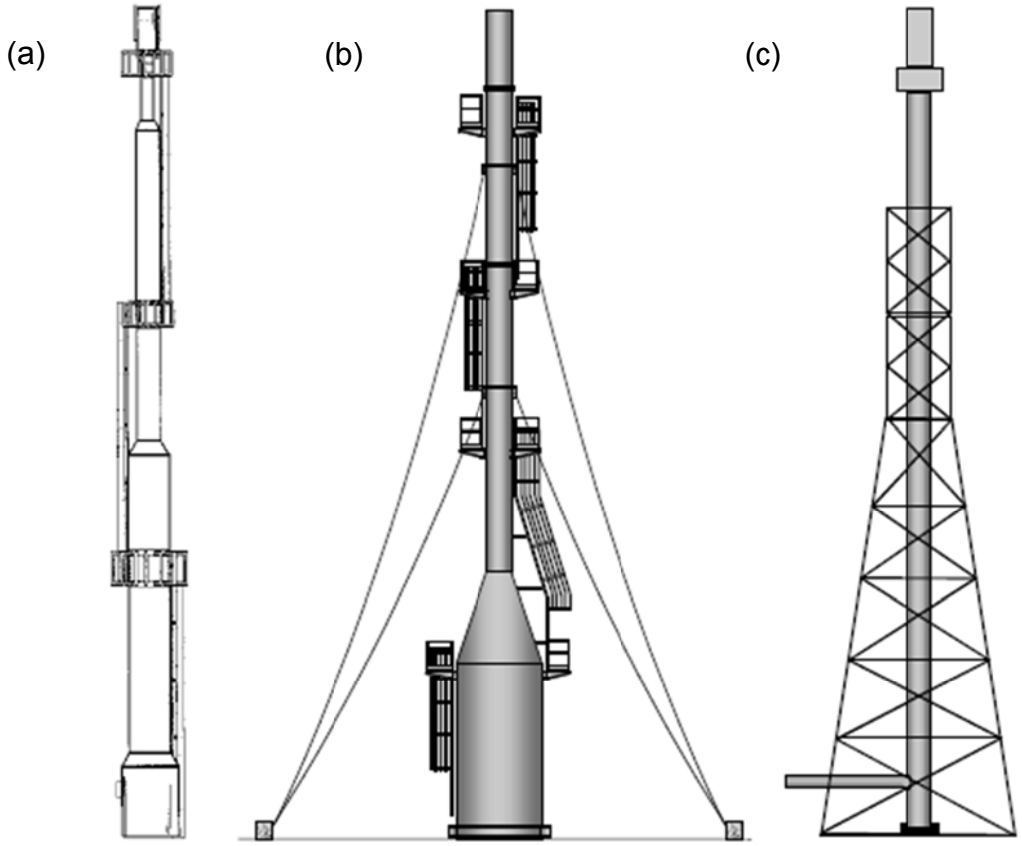
O material queimado na tocha é uma mistura que pode conter desde hidrogênio até hidrocarbonetos pesados e, em alguns casos, até gases inertes.

Os tipos de tocha mais utilizados na indústria de petróleo e na petroquímica estão descritos a seguir.

2.2.2.1 Verticais (*Elevated*)

Existem diversos tipos de suporte para as tochas verticais, sendo os mais comuns: Autoportante (*Self-supported*), Estaiado (*Guyed*) – com o uso de cabos e Estrutura de apoio (*Derrick supported*).

Na Figura 2 são encontrados modelos dos três tipos de tochas verticais supracitados.



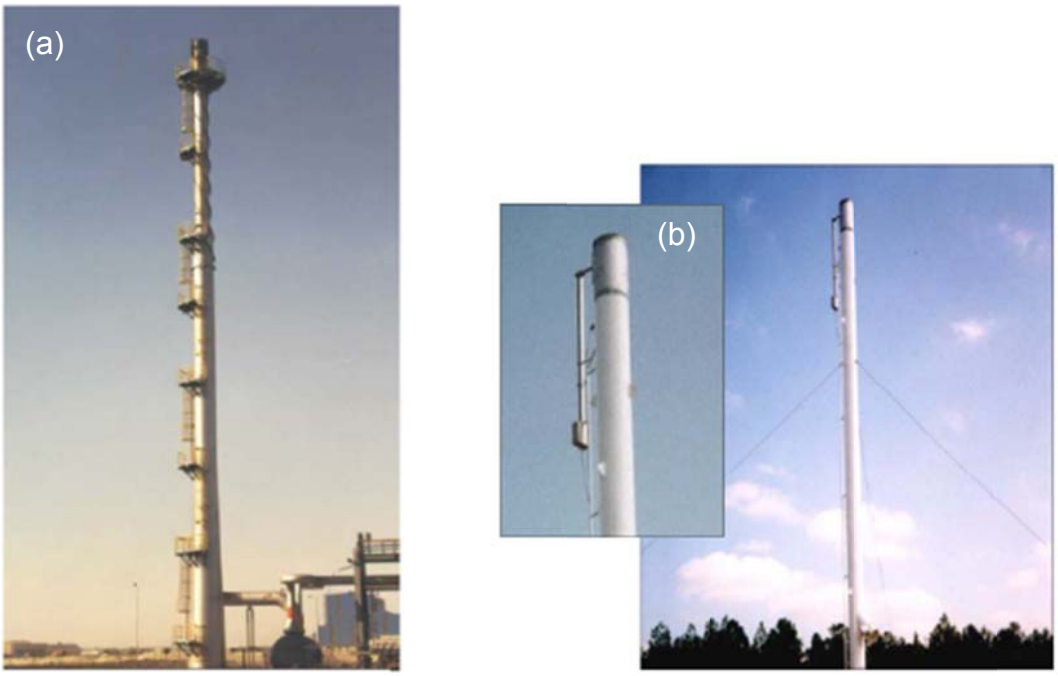


Figura 2: (a) Autoportante (*Self-supported*), (b) Estaiado (*Guyed*) e (c) Estrutura de apoio (*Derrick supported*) (API STD 537, 2003 e http://www.flareindustries.com/products)

2.2.2.2 Horizontais

A Figura 3 mostra uma ilustração de tocha horizontal. Na Figura 5(b) também é apresentado um modelo real deste tipo de *flare*.

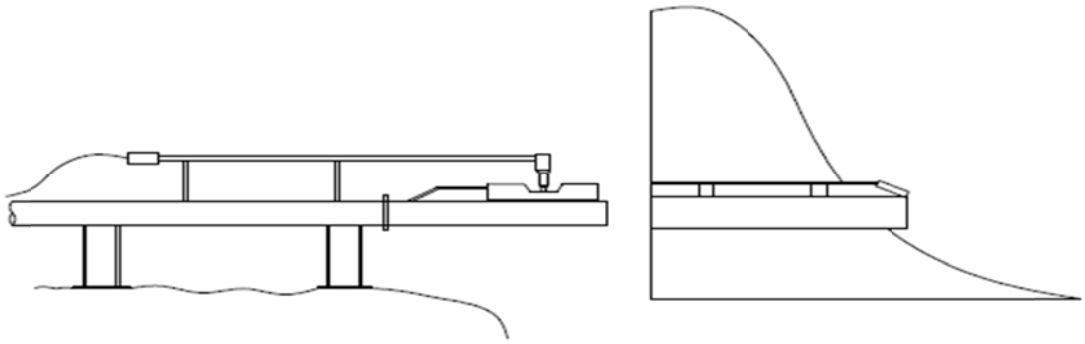


Figura 3: *Flare* horizontal (ANSI/API ST 537, 2008)

2.2.2.3 Enclausurados (*Enclosed*)

Enclosed flares são construídos com o objetivo de impedir a visualização direta da chama (Figura 4). Outros benefícios como a redução de ruído e de radiação térmica para os arredores, assim como a combustão sem fumaça, também são alcançados. Porém, este sistema possui limitações de vazão de modo que não se exponha a chama à visualização. Sistemas com múltiplos queimadores são utilizados para atingir vazões mais elevadas.

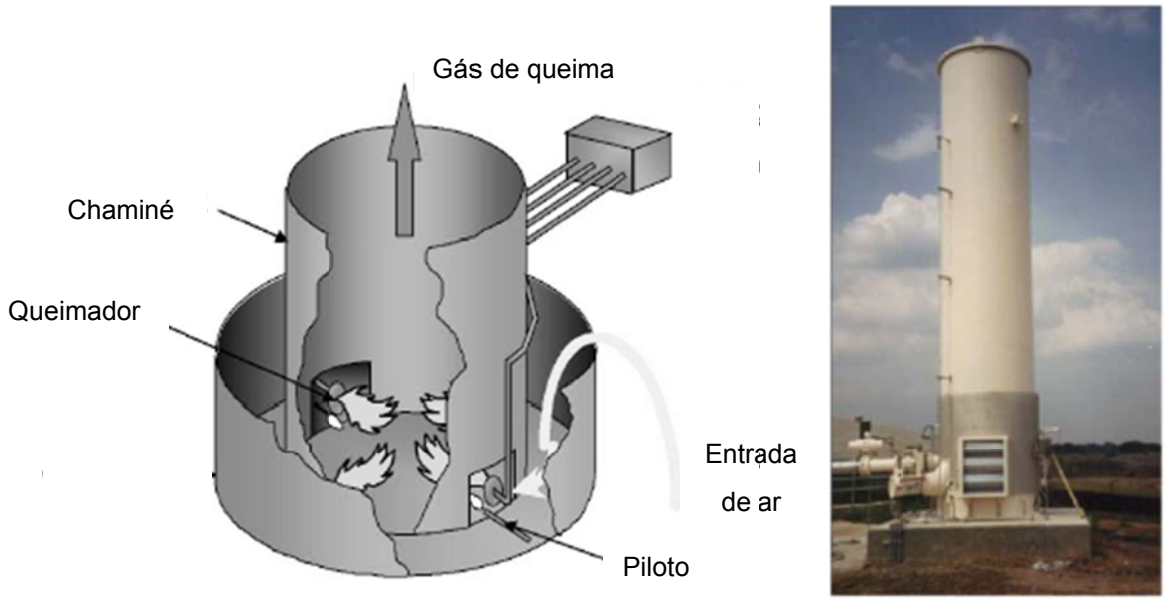


Figura 4: *Flare* enclausurado – *Enclosed Flare* (Adaptado de API STD 537, 2003 e http://www.flareindustries.com/products)

Com relação aos tipos de queimadores, têm-se os de ponto único (*Single point*) e Multiponto (*Multi-point*). Ambos podem ser utilizados nos tipos de *flares* supracitados. O de ponto único possui apenas uma saída para os gases, já o multiponto apresenta várias saídas.

2.2.2.4 *Single point flare*

O *single point flare* pode ser dimensionado com ou sem equipamento supressor de fumaça e é normalmente instalado na posição vertical (Figura 5(a)), mas, em alguns casos, pode ser posicionado horizontalmente (Figura 5(b)). Tochas horizontais geralmente são limitadas a instalações de perfuração e produção de petróleo onde há maior probabilidade de ocorrência de líquidos não recuperáveis.

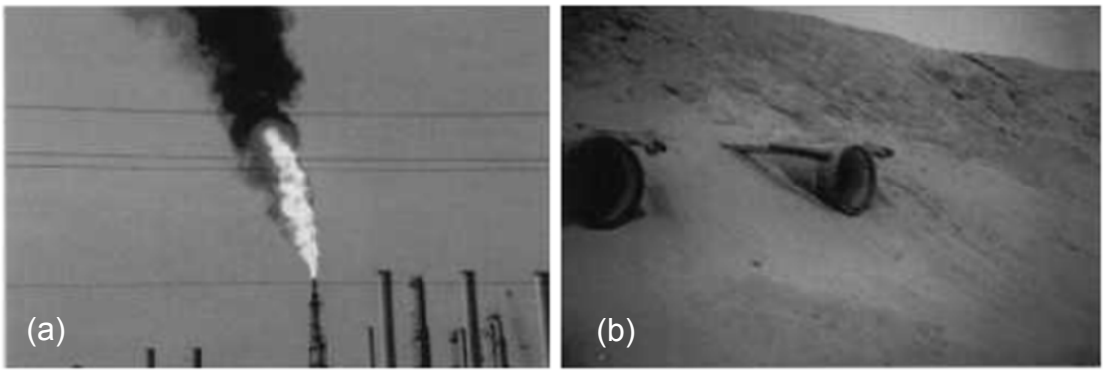


Figura 5: Típico *Single point flare* na vertical (a) e na horizontal (b) (Baukal e Schwartz, 2001)

2.2.2.5 *Multi-point flares*

Multi-point flares são utilizados em refinarias e indústrias petroquímicas com o objetivo de melhorar a queima e eliminar a formação de fumaça, dividindo-se a vazão de gás em uma série de queimadores. Os diversos queimadores podem ser distribuídos em forma de rede instalada próxima ao solo – *Ground Flare* (Figura 6(a)) ou em nível elevado – Vertical (Figura 6(b)).

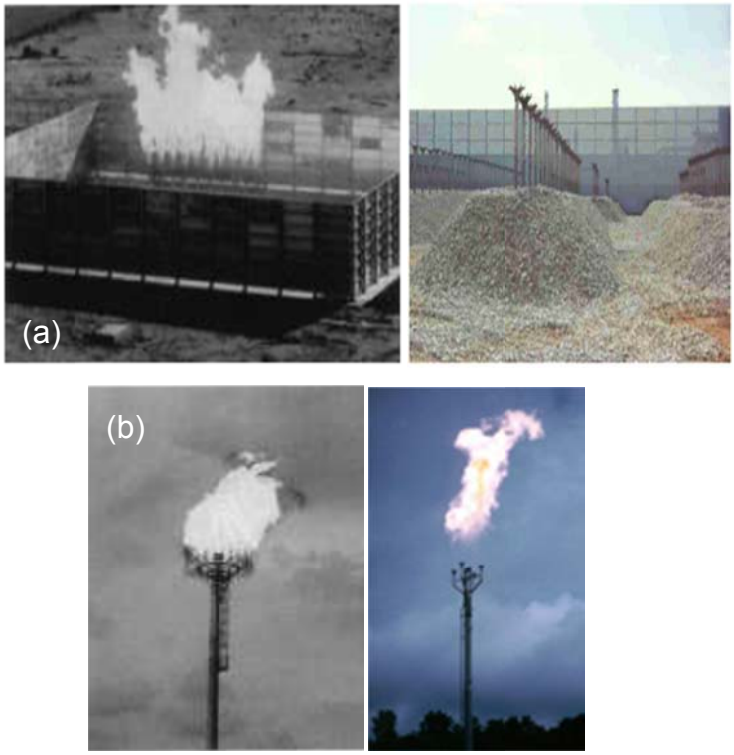


Figura 6: Típico *muti-point flare* próximo ao solo (a) ou em nível elevado (b) (Baukal e Schwartz, 2001 e http://www.flareindustries.com/products)

2.2.2.6 Sistemas combinados

Um sistema combinado muito comum é a associação de um *enclosed flare*, de capacidade limitada, com um *flare* vertical dimensionado para a vazão máxima da instalação (Figura 7(a)). Neste sistema, apenas há exposição da chama durante eventos de maior monta. Outras combinações, como a associação de um *flare* do tipo *single point* com um do tipo *multi point,* também são encontradas (Figura 7(b)).

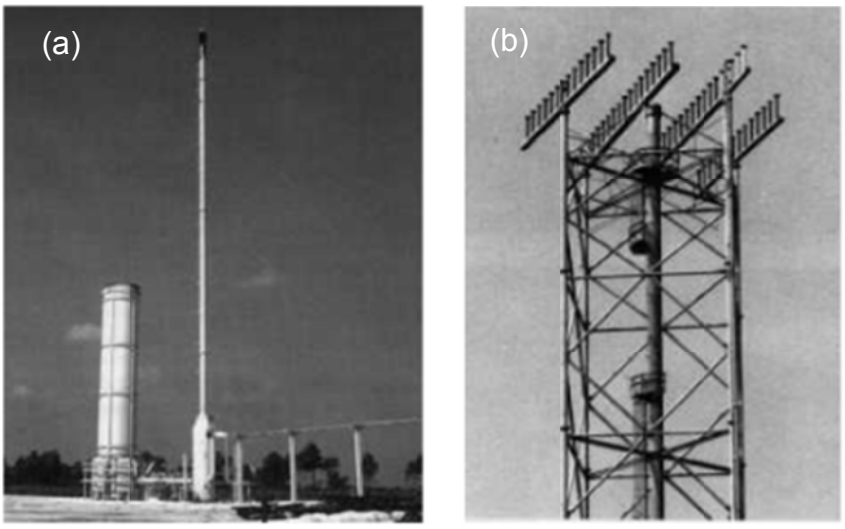


Figura 7: Sistema combinado *enclosed flare* com *flare* vertical (a) e sistema combinado *single point flare* com *multi-point flare* (b) (Baukal e Schwartz, 2001)

Vale ressaltar que todos os tipos citados acima podem operar em regime sônico ou subsônico.

2.3 Projeto de Tochas

Dentre os fatores que mais influenciam a especificação do *flare* estão aqueles que têm maior impacto no tamanho do sistema, no impacto ambiental e no custo. Os fatores mais importantes são os seguintes:

- vazão
- composição, temperatura e pressão do gás
- custos e disponibilidade de utilidades
- requisitos de segurança e meio ambiente

A vazão é a informação mais importante para o projeto do *flare*. A determinação de uma vazão que seja um dado realista sobre as diversas condições do processo é de suma importância. Uma estimativa superdimensionada da vazão leva a um aumento das dimensões dos equipamentos, aumentando os custos de capital e de operação, e reduzindo o tempo de vida útil do sistema.

Ao se assumir que a vazão a ser enviada para o *flare* equivale à soma das vazões de todos os dispositivos de alívio de uma unidade, certamente, o resultado obtido será uma instalação de enormes proporções. Claramente, este tipo de abordagem é dispendiosa e injustificável, pois é possível demonstrar que um evento que culmine no alívio simultâneo de todas as válvulas de segurança, nas suas

vazões de projeto, é impossível de ocorrer (Goyal e Al-Ansari, 2009).

Por outro lado, uma vazão subestimada tem como consequência o projeto de um sistema ineficiente e pouco seguro. Atualmente, existem simuladores dinâmicos capazes de estimar, de uma forma realista, a vazão a ser aliviada para o sistema de *flare* em diversos cenários.

A composição do gás a ser queimado pode influenciar o projeto do *flare* de diversas maneiras. Por exemplo, a relação entre as quantidades de carbono e hidrogênio é um parâmetro que pode indicar a tendência à formação de fumaça na queima do gás. A análise do gás a ser queimado também pode revelar a presença de não-hidrocarbonetos na sua composição, como sulfeto de hidrogênio e gases inertes. Esses gases fazem com que o equipamento necessite de materiais especiais e o projeto tenha que considerar, por exemplo, a análise de suas concentrações ao nível do solo. A radiação emitida pela queima e a possibilidade de condensação do gás em condições ambientes também são informações de grande importância obtidas pela composição do gás para o correto dimensionamento do sistema.

A temperatura do gás impacta diretamente na possibilidade de condensação do gás ou de fluxo bifásico. Esta possibilidade torna necessária a previsão de equipamentos para remoção do líquido de modo a evitar uma maior tendência à formação de fumaça e/ou a possibilidade de ocorrência de uma “chuva” de gotículas a alta temperatura ao redor do equipamento. A condensação pode resultar também em uma condição de vácuo dentro do *header* do *flare* acarretando a entrada de ar dentro da tubulação. Tanto altas como baixas temperaturas podem afetar no projeto da tocha devido à variação da temperatura ao longo da tubulação. Em casos onde a pressão do gás liberado é muito alta o projetista deve considerar o resfriamento por expansão através da válvula de alívio. Quando a temperatura da fonte é muito diferente da ambiente é aconselhável estimar uma perda ou ganho de calor através das paredes do *header* (Baukal e Schwartz, 2001).

Há que se avaliar também os custos e disponibilidade das utilidades, visto que para uma *smokeless burning* é usual o uso de vapor ou ar a baixa pressão, além do gás de purga.

No projeto de tocha tem-se grande preocupação com os requisitos de segurança e meio ambiente, incluindo radiação térmica, ignição confiável, ruído, penetração do ar e dispersão dos gases. Os impactos ao meio ambiente e à saúde serão descritos com mais detalhes no item 2.5.

A avaliação da dispersão atmosférica de uma nuvem, decorrente de uma liberação repentina de materiais inflamáveis ou tóxicos, é uma ferramenta útil para projetar corretamente *flares*, respiradouros (*vents*) e outros dispositivos de segurança, já que requer cautela a fim de evitar a ignição ou explosão e para conter esses

materiais em níveis aceitáveis de calor e toxicidade.

Para a localização de um *flare*, a exposição de pessoas e estruturas à radiação térmica também deve ser levada em consideração. Esta análise também possibilita quantificar o risco potencial relacionado aos vários tipos de acidentes que podem ocorrer em plantas industriais.

Um modelo de dispersão adequado é necessário para correlacionar as principais características de fonte, liberação e campo atmosférico. Com relação ao modelo de dispersão, o trabalho de Palazzi *et al.* (2003) indica que a liberação de hidrocarbonetos dá origem a nuvens inflamáveis mais extensas e que a extensão da área de inflamabilidade depende mais do diâmetro do queimador que das características da liberação.

A escolha do diâmetro de saída é condicionada pela velocidade de emissão. A velocidade deve ser suficientemente alta, para permitir uma diluição efetiva dos gases liberados com o ar, mas não superior à velocidade sônica nas condições de saída, a fim de evitar excesso de ruído e auto-ignições devido ao choque térmico ou porque velocidades muito altas podem provocar a falha da chama.

No dimensionamento de respiro de segurança, as velocidades de gás relativamente elevadas permitem reduzir a altura da chaminé e a extensão das zonas de risco. Em caso de *flares*, favorecem a combustão completa e ajudam a prevenir *flashbacks* perigosos (Bodurtha, 1958).

2.3.1 Distância segura contra o risco de ignição

É importante avaliar a distância da tocha a possíveis fontes de ignição, durante um projeto desse sistema, de modo a evitar a ignição indesejada de uma nuvem inflamável, caso a chama se apague.

Palazzi, Palazzi e Fabiano (2003) propuseram equações para o cálculo da distância adequada e indicam que a máxima extensão horizontal de uma nuvem inflamável é encontrada em liberações de hidrocarbonetos, e aproximadamente varia entre 10 e 100 m, quando o fluxo de massa aumenta de 10 a 1000 kg s^{-1}.

2.3.2 Altura do *flare*

O topo do *flare* normalmente está a uma altura onde o perfil do vento, que é crescente com a altitude, não sofre mais interferência de obstáculos próximos ao solo,

e consegue dispersar os gases emitidos. A determinação da altura do *flare* geralmente está atrelada à intensidade de calor radiante gerado pela chama.

Ao contrário do risco de ignição, onde o contato entre as fontes de ignição e as misturas inflamáveis deve ser evitado de qualquer maneira, a irradiação de calor sempre existe na proximidade de um *flare*, de modo que a avaliação das distâncias de segurança, seja para as pessoas trabalhando em torno dele ou para as estruturas existentes, implica uma comparação entre as exposições reais e as admissíveis. Geralmente distinguem-se três zonas em torno do *flare* (Palazzi, Palazzi e Fabiano, 2003):

- uma área segura, onde um trabalhador normalmente vestido pode operar continuamente, uma vez que a intensidade térmica máxima incidente sobre ele é tolerável para qualquer momento;
- uma área intermediária, onde um trabalhador normalmente vestido pode ocasionalmente operar, uma vez que, em caso de fuga, a exposição térmica máxima incidente sobre ele é tolerável em qualquer instante durante o tempo, decorrido entre o súbito aumento da intensidade do *flare* e o alcance da zona de segurança;
- uma área proibida para os trabalhadores, desde que a sua exposição ao fluxo térmico máximo se torne não tolerável, mais cedo ou mais tarde, antes que eles possam alcançar a zona de segurança.

Deve ser observado que a zona intermediária é para ser considerada uma área onde somente pessoas treinadas para ações evasivas e equipadas com roupas protetoras e outros dispositivos podem operar por tempo limitado e não operações de rotina (por exemplo, ações de manutenção ou de emergência).

Aumentando a altura de emissão acima de um determinado valor crítico, todos os locais ao nível do solo tornam-se seguros.

Conforme a ANSI/API STD 521 (2008) os níveis recomendados de intensidade de radiação à exposição pessoal, I, estão apresentados na Tabela 1. Na maioria dos casos, equipamentos e estruturas possuem maior tolerância à radiação que as definidas para pessoas.

Tabela 1: Níveis de radiação térmica recomendados à exposição pessoal (Modificada da ANSI/API STD 521, 2008)

Nível de radiação permissível I kW/m^2 (Btu/h*ft^2)	Condições
9,43 (3000)	Máxima intensidade de radiação em qualquer local onde seja requerida ação de emergência por pessoas. Pessoas que entrem ou trabalhem em área com intensidade de radiação superior a 6,31 kW/m^2 (2000 Btu/h*ft^2) devem portar aparelho de proteção especial e/ou blindagem contra radiação. É importante identificar que pessoas com vestimentas apropriadas só toleram radiação a 6,31 kW/m^2 (2000 Btu/h*ft^2) por alguns segundos.
6,31 (2000)	Máxima intensidade de radiação em áreas onde são requeridas ações de emergência por até 30 s por pessoas sem blindagem, mas com vestimenta apropriada.
4,73 (1500)	Máxima intensidade de radiação em áreas onde são requeridas ações de emergência durante 2 a 3 minutos por pessoas sem blindagem, mas com vestimenta apropriada.
1,58 (500)	Máxima intensidade de radiação em áreas onde pessoas com vestimenta apropriada podem ficar continuamente expostas.

A norma ANSI/API STD 521 (2008) indica a equação de Hajek e Ludwig (1960) para o cálculo da radiação de chama considerando que a chama tem um único epicentro radiante. Esta equação é aplicável tanto para *flares* sônicos como subsônicos, usando corretamente o fator Fi:

$$D = \sqrt{\frac{\delta FiQ}{4\pi I}} \tag{2.1}$$

Onde:

D =distância mínima entre o epicentro da chama e o objeto em questão (metros);

δ = fração do calor irradiado transmitido através da atmosfera;

Fi = fração do calor irradiado;

Q = calor liberado (kW ou Btu / h);

I = intensidade do calor radiante (kW/m^2 ou Btu / h. ft^2)

A qualidade de combustão afeta as características de radiação. A ANSI/API STD 521 (2008) apresenta dados para auxiliar no cálculo de uma altura conservativa para o *flare*. O vento também influencia na inclinação da chama, variando a distância do centro da chama ($\sum \Delta x$) e ($\sum \Delta y$) e algumas considerações também devem ser feitas a esse respeito.

Determina-se então, uma distância (r) a partir da base do *flare* em que se concentra um raio de intensidade de radiação no limite recomendado. Para uma velocidade de fuga suficiente dentro do tempo estipulado na Tabela 1, avalia-se esse raio. Como estimativa a ANSI/API STD 521 (2008) considera a distância de 150 ft (45,7m) para um limite máximo de radiação de 6,3 kW/m^2 (2000 Btu/h.ft^2).

De posse deste raio (r) e da distância (D) entre o epicentro da chama e este raio, calculada pela Equação 2.1, obtém-se através do teorema de Pitágoras ($D^2=r'^2+h'^2$) a altura do *flare* (h). A Figura 8 ilustra as dimensões mencionadas.

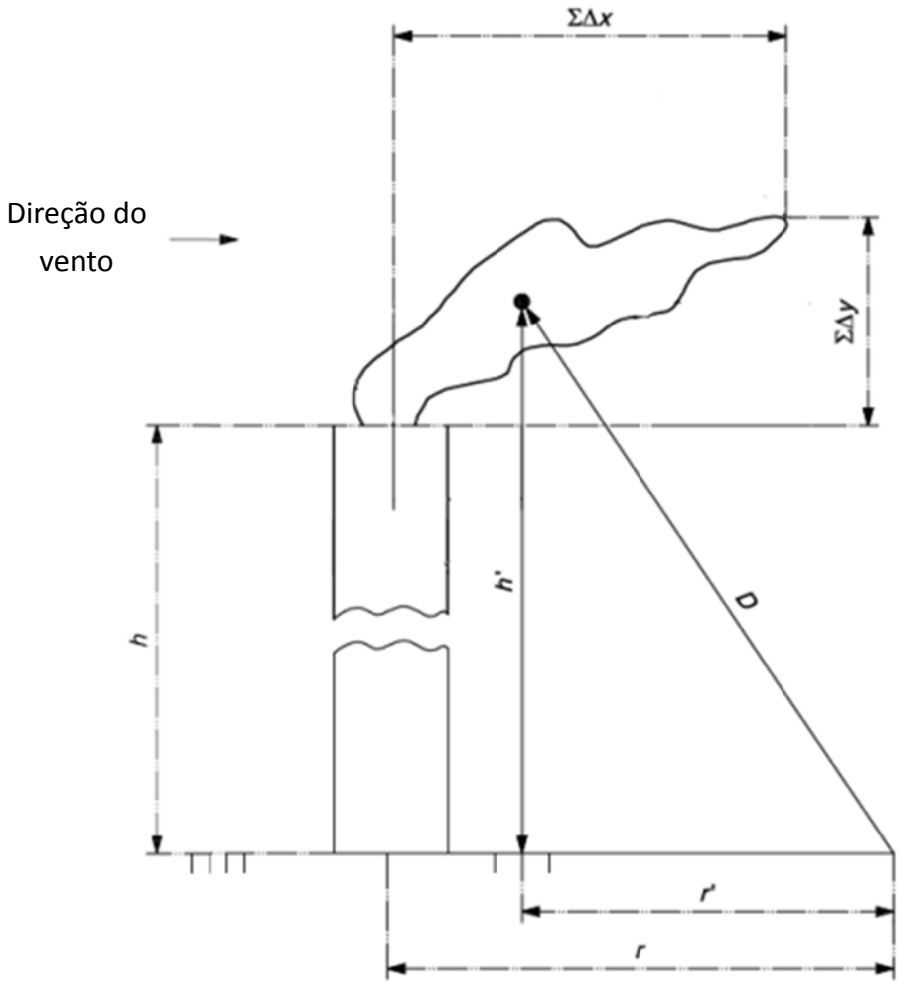


Figura 8: Referências dimensionais para projeto de *flare* (Modificada da ANSI/API STD 521, 2008)

O modelo mais usual é o *flare* elevado que tem o queimador no topo, permitindo uma menor intensidade de radiação no nível do solo e conseguindo maior dispersão de gases tóxicos. Para os três tipos de *flare* elevado, já citados anteriormente, seguem informações típicas sobre a altura dessas tochas:

Autoportante: Requer apenas a área suficiente para a sua base e capacidade para atender ao nível seguro de radiação térmica, mas tem altura limitada de 60 a 90 metros.

Estaiado: É o modelo de menor custo, mas exige maior área devido aos cabos guiados, que geralmente têm raio equivalente à metade da altura do *flare*. A altura usual para esse *flare* varia de 180 a 250 metros.

Estrutura de apoio: Esse modelo é usado quando o autoportante não é aplicável (altura superior a 90m) ou quando a área é limitada. Entretanto, este modelo possui fácil manutenção e inspeção já que sua própria estrutura permite retirar/descer a coluna da tocha e queimador com facilidade.

2.4 Teoria de combustão

Combustão é uma reação química exotérmica em que há transformação da energia estocada nas ligações químicas em calor (energia térmica), luz (energia eletromagnética), energia elétrica (íons e elétrons livres) e energia mecânica (ruído).

Para que a combustão ocorra é necessário o triângulo (tetraedro) de fogo: Combustível, comburente, ignição e reações intermediárias.

Os combustíveis são os hidrocarbonetos basicamente compostos por carbono, hidrogênio, oxigênio, enxofre e nitrogênio. O comburente normalmente utilizado é o oxigênio do ar (79% N_2 e 21% O_2). As proporções de combustível e comburente devem estar dentro da faixa de inflamabilidade.

É importante para que a reação ocorra e se mantenha estável, que a mistura ar x combustível seja até nível molecular, que tenha turbulência adequada, que o tempo de permanência do combustível seja suficiente, que a temperatura seja maior que a mínima requerida (ignição) e que ocorra a difusão das espécies químicas.

A equação geral da combustão é:

$$C_A H_B + a(O_2 + 3{,}76N_2) = bCO_2 + cH_2O + 3{,}76aN_2$$

Onde

$$a = A + \frac{B}{4} \qquad b = A \qquad c = \frac{B}{2}$$

O processo de combustão pode resultar ainda nas seguintes emissões/geração de poluentes: o enxofre do combustível resulta em dióxido de enxofre (SO_2) e este ainda poderá ser oxidado para trióxido de enxofre (SO_3) e o nitrogênio resulta na formação de óxidos de nitrogênio (NO_x). A combustão incompleta (não adequada) resulta na formação/geração de fuligem, monóxido de carbono (CO) e outros

compostos parcialmente oxidados.

Com relação à dispersão de gases de um jato na ausência de vento, Cude *apud* Palazzi (2002) demonstrou que a vazão mássica do jato aumenta linearmente ao longo do eixo do jato, o que implica que em qualquer posição o ar é arrastado para dentro do jato a uma taxa constante.

Segundo Baukal e Schwartz (2001) queimadores de *flare* têm uma eficiência de combustão de mais de 98% e, para estimativa de emissão de SO_x, costuma-se assumir que 100% do enxofre disponível foi convertido em SO_2.

2.5 Impactos ao meio ambiente e à saúde

O processo de combustão em queimadores provoca a emissão significativa dos poluentes: materiais particulados (MP), óxidos de enxofre (SOx) e óxidos de nitrogênio (NOx) (Serfaty, 2010).

2.5.1 Emissão de Óxidos de Enxofre

Os óxidos de enxofre produzidos na combustão são prejudiciais à saúde humana e à vegetação. O grau de toxicidade do SO_2 é mostrado na Tabela 2, segundo informações de Serfaty (2010).

Tabela 2: Grau de toxicidade do SO_2 em seres humanos e vegetais (Adaptado de Serfaty, 2010).

Vegetais	**Doses limites**
Plantas muito sensíveis	1 ppm
Plantas sensíveis	1,5 a 2 ppm
Plantas bastante resistentes	3 ppm
Seres humanos / Vegetais	
Doses limites	**Efeitos da toxicidade à saúde**
0,2 mg/m^3	Nenhum efeito detectável nas pesquisas epidemiológicas
0,25 mg/m^3 durante 1 mês	Nenhum efeito sobre os vegetais
0,30 mg/m^3 durante 1 ano	Aumento das dispnéias em pessoas com mais de 65 anos (Gênova)

0,50 mg/m^3 durante 24 hs	Aumento do número de mortes em Londres
0,60 mg/m^3 durante 24 hs	Nenhum efeito sobre os vegetais
0,65 mg/m^3 durante 24 hs	Aumento do número de mortes em Rotterdam
0,70 mg/m^3 durante 3 meses	Irritação pulmonar
0,80 mg/m^3 durante 48 hs	Duplicação da mortalidade em Londres
0,85 mg/m^3 durante 24 hs	Lesões nos vegetais e, durante 72 hs, triplicação da mortalidade e aumento do não comparecimento ao trabalho
2,6 mg/m^3	Espasmo dos brônquios
4,0 mg/m^3 durante 1 h	Lesões nos vegetais
30 mg/m^3	Tosse
60 mg/m^3	Irritação nos olhos

A oxidação do enxofre pode formar SO_2 e SO_3. A queima pode se dar dentro da chama, basicamente devido à ação do oxigênio atômico, primeiramente produzindo SO_3 e posteriormente, por causa do equilíbrio termodinâmico a altas temperaturas, levando ao composto mais estável SO_2. Como as velocidades de reação são elevadas, logo após a chama a concentração de SO_3 é bem reduzida e proporcional à temperatura e ao excesso de ar. A partir deste ponto a taxa de conversão de SO_2 a SO_3 respeita o equilíbrio termodinâmico.

De acordo com um recente relatório sobre emissões de poluentes atmosféricos, o SO_2 é o segundo maior poluente emitido depois dos hidrocarbonetos (PEMEX, 2001).

Dióxido de enxofre (SO_2) é o principal produto da combustão de sulfeto de hidrogênio. O destino do SO_2 varia entre as regiões geográficas e depende das condições atmosféricas locais e sazonais. Parte dele oxida a sulfatos (SO_4^{2-} principalmente sob a forma de H_2SO_4). A taxa de transformação varia de acordo com o isolamento solar e teor de umidade do ar (Cheng, 1994). Anualmente, 7% das emissões de dióxido de enxofre totais são depositados no solo por deposição úmida (dissolvido em gotas de chuva desprezíveis durante o inverno) e outros 22% pelo processo de remoção a seco. Neste último caso, quando o SO_2 encontra diretamente um objeto físico (por exemplo, edifícios), ele é removido do ar. É por esta razão que os modelos de dispersão atmosférica incluem muitas vezes um termo de "decaimento" para deposição seca ao modelar a dispersão no ambiente urbano (Scott *et al.*, 2003).

2.5.2 Emissão de Óxidos de Nitrogênio

Os óxidos de nitrogênio tem significativa importância porque participam de um processo de reações químicas complexas de oxidação com a luz solar que contribuem para a formação de um *smog* fotoquímico na atmosfera.

Pela norma *US Clean Air Act – National Ambient Air Quality Standards* o padrão para qualidade do ar com respeito aos óxidos de nitrogênio prevê para qualquer padrão (primário ou secundário) uma concentração máxima anual de 100 mg/m^3 (Serfaty, 2010).

O NOx é nocivo à saúde humana e pode causar metaemoglobinemia (perda da capacidade da ferro-hemoglobina de ligar-se reversivelmente ao oxigênio, diminuindo a oxigenação do corpo humano); edemas pulmonares (preenchimento dos alvéolos pulmonares com plasma, causando morte por sufocação) e juntamente com o ozônio afeta a permeabilidade das membranas celulares das plantas, diminuindo a capacidade de fotossíntese (Serfaty, 2010).

2.5.3 Toxicidade das substâncias químicas

A principal função do sistema respiratório é trocar oxigênio e gás carbônico entre o sangue e o ar inalado. A cada minuto, uma pessoa normal em descanso usa 250ml de O_2 e expira 200ml de CO_2 em aproximadamente 8 litros de ar inspirados (Crowl e Louvar, 2002).

O sistema respiratório pode ser dividido em duas áreas: sistema respiratório superior e inferior. O superior, do qual fazem parte boca, nariz e traquéia, é responsável por filtrar, aquecer e umidificar o ar. O sistema inferior, composto do pulmão e estruturas menores, como brônquios e alvéolos, faz a troca gasosa com o sangue. Esses sistemas respondem diferentemente à presença de compostos tóxicos. O trato respiratório superior é mais afetado por tóxicos solúveis em água como HCl, HBr, NOx, SOx; e o inferior por compostos que bloqueiam fisicamente a transferência gasosa nos alvéolos, que incluem os monômeros, halogêneos e outros como H_2S, poeira de amianto e sílica.

Conforme Palazzi, Palazzi e Fabiano (2003) o principal requisito de segurança para a exposição dos trabalhadores a substâncias tóxicas é que, independente das condições atmosféricas, a concentração máxima ao nível do solo seja menor ou igual a um nível admissível. Os valores admissíveis são fixados por norma, de acordo com o tipo de poluente, a duração da exposição e que pessoas serão expostas (normalmente as restrições são menos severas para os trabalhadores do que para o

público que vive perto da indústria).

Entende-se por TLV (*Threshold limit value*) como o valor a partir do qual se tem uma resposta do organismo a uma determinada dose de composto tóxico. Essa dose limite foi determinada pela ACGIH (*American Conference of Governmental Industrial Hygienists*), e abaixo dessa dose o corpo humano é capaz de se desentoxicar e eliminar o agente tóxico sem danos que possam ser detectados. O TLV-TWA (*Time-Weight Average*) é o valor da dose média suportada por funcionários em um dia normal de trabalho de 8 horas ou 40 horas semanais sem qualquer efeito nocivo à saúde. As concentrações TWA não podem ser excedidas durante qualquer período das 8 horas de trabalho ou 40 horas semanais. O limite de exposição de curta duração (TLV-STEL) é um limite de exposição média ponderada em 15 minutos, que não deve ser ultrapassado em nenhum momento da jornada de trabalho. Acredita-se que esta é a concentração à qual o trabalhador possa estar exposto continuamente por período curto sem sofrer: irritação, lesão tissular crônica ou irreversível, efeitos tóxicos dose-dependentes ou narcose que predisponha a acidentes, impossibilite autossalvamento ou reduza eficiência no trabalho.

A OSHA (*Occupational Safety and Health Administration of the United States*) definiu seu próprio nível permissível de exposição (PEL-*Permissible exposure level*) correspondente ao TLV.

A Tabela 3 apresenta os valores de TLVs e PELs para alguns compostos químicos.

Tabela 3: TLVs e PELs para alguns compostos químicos (Modificada de Crowl e Louvar, 2002 e ABHO, 2008).

Substância	ACGIH TLV-TWA		OSHA PEL	
	ppm	mg/m^3, 25ºC	ppm	mg/m^3, 25ºC
Amônia (STEL)	25	18	50	35
Butano	1000	1900		
Pentano	600	1770	1000	2950
Dióxido de carbono (STEL)	5000	9000	5000	9000
Monóxido de carbono	25	29	50	55
Gasolina (STEL)	300	900		
Hexano	50	176	500	1800
Heptano (STEL)	400	1600	500	2000
Sulfeto de hidrogênio (STEL)	10	14	20	28
Dióxido de nitrogênio (STEL)	3	5.6	5	9
Dióxido de enxofre (STEL)	2	5.2	5	13

A agência americana EPA (*Environmental Protection Agency*) criou o regulamento *Risk Management Plan* (RMP) que objetiva diminuir o número e magnitude de acidentes devido à emissão de substâncias tóxicas e inflamáveis.

Na legislação brasileira a Portaria n. 3214 de 8/6/1978 aprova as Normas Regulamentadoras (NRs) sobre segurança e medicina no trabalho. A NR-15, que aborda as atividades e operações insalubres, aponta limites de tolerância para a exposição a diversos agentes químicos, válidos para jornadas de trabalho de até 48 horas por semana, inclusive (Tabela 4). Limite de tolerância é a concentração ou intensidade máxima ou mínima, relacionada com a natureza e o tempo de exposição ao agente, que não causará dano à saúde do trabalhador, durante sua vida laboral. Vale ressaltar que a NR-9 indica que na ausência de limite para determinada substância na NR-15, devem ser adotados valores estabelecidos pela ACGIH.

Alguns compostos são classificados como "Asfixiantes simples" e a norma determina que nos ambientes de trabalho, em presença destas substâncias, a concentração mínima de oxigênio deverá ser de 18% em volume; caso contrário, serão consideradas situações de risco grave e iminente. Exemplos de asfixiantes simples são : Etano, Eteno, Metano, Propano, Propeno, Acetileno e Hidrogênio.

Tabela 4: Tabela de limites de tolerância (Modificada da NR-15 da Portaria n. 3214 de 8/6/1978)

Substância	Limite de Tolerância	
	ppm	mg/m^3
Amônia	20	14
Butano	470	1090
Pentano	470	1400
Dióxido de carbono	3900	7020
Monóxido de carbono	39	43
Sulfeto de hidrogênio	8	12
Dióxido de nitrogênio	4	7
Dióxido de enxofre	4	10

2.5.4 Efeito Estufa e Aquecimento Global

Os oceanos e a superfície terrestre absorvem parte da energia solar permitindo o aquecimento da atmosfera terrestre e o restante da energia é refletido de volta para o espaço. Parte do calor absorvido é irradiado de volta ao espaço, porém é bloqueado devido a presença de gases de efeito estufa, que deixam que energia solar (emitida em comprimentos de onda menores) atinjam a superfície, mas são opacos à radiação terrestre (emitida em comprimentos de onda maiores). Dessa forma, essa camada de gases ao redor da Terra, que forma o fenômeno do efeito estufa, proporciona a energia suficiente para manter a temperatura média global ideal para a vida humana.

Contudo, devido às atividades antropogênicas, a concentração de gases estufa tem aumentado na atmosfera terrestre acarretando o aquecimento global (aumento da temperatura média global do ar e dos oceanos), que traz como consequência o derretimento da neve e do gelo e a elevação do nível do mar. Furacões, tufões, maremotos e enchentes podem ocorrer com mais intensidade, e se a temperatura dos mares continuar se elevando, pode ocorrer um desvio de curso de correntes marítimas, acarretando a extinção de diversos animais marinhos e diminuição da quantidade de peixes.

Segundo o Ministério do Meio Ambiente (2013), há quatro principais gases de efeito estufa (GEE):

- ✓ O dióxido de carbono (CO_2) é o mais abundante e suas principais emissões estão vinculadas às inúmeras atividades humanas como a queima de combustíveis fósseis (petróleo, carvão e gás natural) e a mudança no uso da terra. A quantidade de dióxido de carbono na atmosfera aumentou 35% desde a era industrial, em 2005 atingiu um valor recorde de 379 partes por milhão em volume (ppmv) – o equivalente a um aumento de quase 100 ppmv desde a era pré-industrial. Este gás é utilizado como referência para classificar o poder de aquecimento global dos demais gases de efeito estufa;
- ✓ O metano (CH_4) é produzido pela decomposição da matéria orgânica, sendo encontrado geralmente em aterros sanitários, lixões, reservatórios de hidrelétricas, criação de gado e cultivo de arroz. Este gás tem poder de aquecimento global 21 vezes maior que o dióxido de carbono;
- ✓ O óxido nitroso (N_2O) tem emissões resultantes do tratamento de dejetos animais, do uso de fertilizantes, da queima de combustíveis fósseis e de alguns processos industriais. Este gás tem poder de aquecimento global 310 vezes maior que o CO_2;

✓ O hexafluoreto de enxofre (SF_6) tem grande utilização como condutor de calor e isolante térmico, tem o maior poder de aquecimento, o equivalente a 23.900 vezes mais ativo que o dióxido de carbono.

O Protocolo de Kyoto, tratado assinado em 1997 por 84 países, definiu metas de redução de emissões de gases de efeito estufa para os países desenvolvidos e medidas limites de emissões para os demais países, até o ano de 2012. Durante a 18ª Conferência das Nações Unidas sobre Mudanças Climáticas (COP-18) em Doha (Catar), entre representantes de 195 países, o Protocolo de Kyoto foi prorrogado até 2020 (Ecodesenvolvimento, 2013). Este protocolo instituiu o controle dos gases supracitados e mais duas famílias de gases, os hidrofluorcarbonos e os perfluorcarbonos:

✓ Os hidrofluorcarbonos (HFCs) são utilizados como substitutos dos clorofluorcarbonos (CFCs) em aerossóis e refrigeradores. Apesar de não agredirem a camada de ozônio, têm em geral, alto potencial de aquecimento global;

✓ Os perfluorcarbonos (PFCs) têm utilização como gases refrigerantes, solventes, propulsores, espuma e aerossóis e têm alto potencial de aquecimento global.

2.5.5 Qualidade do ar

Do ponto de vista da qualidade do ar as três substâncias mais significativas produzidas na combustão são: materiais particulados, óxidos de enxofre e óxidos de nitrogênio. O material particulado, por ser percebido visualmente, recebe atenção especial devido a reclamações da população e dos órgãos ambientais (Serfaty, 2010).

Valores padrões para a qualidade do ar ambiente para material particulado podem ser vistos na Tabela 5.

Tabela 5: Valores Padrões de Material Particulado para Qualidade do Ar Ambiente (Serfaty, 2010)

PAIS	VALOR PADRÃO ($\mu g/m^3$)	TEMPO MÉDIO	TEMPO DE REFERÊNCIA	FREQÜÊNCIA DE ATENDIMENTO [1]
JAPÃO	100	1 DIA	1 ANO	98% (100%)
	200	1 HORA	1 ANO	(100%)
USA	75(primário)	1 ANO [2]		100%
	60(secundário)	1 ANO [2]		100%
	260(primário)	24 HORAS		1 VEZ [3]
	150(secundário)	24 HORAS		1 VEZ [3]
FRANÇA [5])	80	1 DIA		50%
	130	1 DIA		50%
	250	1 DIA		98%
ALEMANHA	150 (tempo longo) [4]	½ HORA	1 ANO	100%
	300 (tempo curto)	½ HORA	1 ANO	95%

1 – Proporção de valores médios monitorados requeridos para atender os respectivos valores padrões
2 – Média Geométrica
3 – Frequência de violação
4 – Média Aritmética
5 – Valores Limites

No Brasil, inicialmente em 1981 com a Lei 6938 e seu decreto regulamentador no. 88.821 de 1983, definiu-se uma legislação com as regras gerais para políticas ambientais, para o sistema de licenciamento e criou-se o Conselho Nacional de Meio Ambiente (CONAMA), com a responsabilidade de estabelecer padrões e métodos ambientais. A Resolução CONAMA no. 01 de 1986 estabeleceu a obrigatoriedade de elaboração de Estudo de Impacto Ambiental (EIA) e Relatório de Impacto no Meio Ambiente (RIMA), para atividades de significativo impacto ambiental.

Os padrões de qualidade do ar nacionais, que definem legalmente os limites máximos de concentração de poluentes a serem lançados para a atmosfera garantindo a saúde humana e do meio ambiente, foram estabelecidos pelo Ibama –

Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis, e aprovados pelo Conama, por meio da Resolução CONAMA nº 03 de 1990.

Esta resolução estabelece dois padrões para a qualidade do ar: Padrões primários, em que as concentrações de poluentes quando ultrapassadas, poderão afetar a saúde da população; e os padrões secundários, em que as concentrações de poluentes abaixo das quais se prevê o mínimo efeito adverso sobre o bem-estar da população, assim como o mínimo dano à fauna, à flora, aos materiais e ao meio ambiente em geral.

O estabelecimento de padrões secundários garante uma política de prevenção da degradação da qualidade do ar, sendo aplicados às áreas de preservação. Às áreas de desenvolvimento, cuja visão é em curto prazo, devem ser aplicados os padrões primários.

Os poluentes regulamentados são: partículas totais em suspensão, fumaça, partículas inaláveis, dióxido de enxofre, monóxido de carbono, ozônio e dióxido de nitrogênio.

A resolução CONAMA nº003 de 28/06/90 estabelece os limites máximos de emissão de poluentes atmosféricos (ver Tabela 6), conforme o PRONAR - Programa Nacional de Controle da Poluição do Ar – instituido na Resolução CONAMA nº 05 de 1989.

Tabela 6: Padrões nacionais de qualidade do ar (Valores extraídos da Resolução CONAMA Nº 03 de 1990)

Poluente	Tempo de amostragem	Padrão Primário ($\mu g/m^3$)	Padrão Secundário ($\mu g/m^3$)
Partículas Totais em Suspensão	CMGA	80	60
	24h	240	150
Fumaça	CMAA	60	40
	24h	150[a]	100[a]
Partículas inaláveis	CMAA	50	50
	24h	150[a]	150[a]
Dióxido de enxofre	CMAA	80	40
	24h	365[a]	100[a]
Monóxido de carbono	8h	10000[a]	10000[a]
	1h	40000[a]	40000[a]
Ozônio	1h	160[a]	160[a]
Dióxido de nitrogênio	CMAA	100	100
	1h	320	190

[a]: que não deve ser excedida mais de 1 vez por ano

CMAA – concentração média aritmética anual

CMGA – concentração média geométrica anual

3 MODELAGEM MATEMÁTICA DA DISPERSÃO GASOSA

A maioria dos acidentes em plantas químicas resulta de vazamentos de substâncias tóxicas, inflamáveis e explosivas (Crowl e Louvar, 2002). Existem diversos modelos de fonte que descrevem como o material é descartado do processo após um incidente, que pode ser a quebra, furo ou ruptura de uma tubulação ou equipamento, reação descontrolada, ou mesmo sistemas de alívio e emissão de gases após combustão em queimadores.

Os modelos fonte fornecem a descrição de vazão, quantidade e estado físico da descarga. Modelos de dispersão são usados em sequência, para descrever como o material é transportado pelo vento e dispersado em diferentes níveis de concentração. Para vazamentos de produtos inflamáveis, modelos de fogo e explosão convertem as informações do modelo fonte em riscos potenciais de energia como radiação térmica ou sobrepressões de explosão.

3.1 Modelos de fonte

Modelos fonte são formulados a partir de equações empíricas ou semi-empíricas que representam os processos físico-químicos no momento em que ocorre um vazamento. Muitas vezes, quando não se conhece inteiramente o processo físico ou as propriedades físicas do material não são devidamente caracterizadas, o modelo fornece apenas uma estimativa grosseira. Em meio a essas incertezas, para se garantir um projeto seguro, deve-se selecionar parâmetros que maximizem a taxa de vazamento e quantidade de material liberado.

Mecanismos de liberação são classificados pelo tamanho do orifício dos vazamentos. Os orifícios largos liberam grandes quantidades de material em curto tempo e os restritos, em que se tem baixa taxa de alívio, as condições de processo a jusante não são imediatamente afetadas.

A liberação de gás pressurizado é determinada também em função da temperatura, pressão e do escoamento compressível. Este último, caracterizado pela razão entre a pressão externa e pressão original do gás, podendo o escoamento ser crítico, no qual a velocidade sônica é atingida, ou subcrítico, com velocidade subsônica (Allen e Ditsworth, 1972; Ramsbil, 1986 *apud* Soares, 2006).

Os cenários mais usuais que podem ser descritos por modelos fonte estão descritos a seguir (Crowl e Louvar, 2002):

- Escoamento de líquido através de furo ou tubos, onde o gradiente de pressão promove a força para o movimento do fluido e as forças de atrito entre o líquido em

movimento e a parede convertem a energia cinética em energia térmica, resultando na redução da velocidade e pressão do líquido.

- *Flash* de líquidos armazenados abaixo de seus pontos de ebulição normais que produzem quantidades significativas de vapor, algumas vezes explosivos, durante um vazamento. O flasheamento ocorre tão rapidamente que o processo pode ser considerado adiabático. O excesso de energia contido no fluido superaquecido faz com que o líquido vaporize reduzindo sua temperatura até seu novo ponto de ebulição.

- Poça de líquido evaporando em que a taxa de evaporação é limitada pela transferência de calor do ambiente para o fluido. O calor pode ser transferido por condução pelo piso, por condução ou convecção pelo ar e também por radiação proveniente do sol ou outra fonte como incêndio.

- Escoamento de vapor através de furo em que diferentemente dos líquidos, para os quais admite-se que suas propriedades físicas permanecem constantes, consideram-se válidas essas ponderações apenas para pequenas variações de pressão (P1/P2<2) e baixas velocidades (<0,3 vezes a velocidade do som no gás). A energia contida no gás, como resultado da sua pressão, é convertida em energia cinética conforme o gás escapa e se expande pelo furo. Assim, com a liberação do gás há mudança na densidade, temperatura e pressão.

Para escoamento de gases através de tubos são propostos dois modelos: comportamento adiabático ou isotérmico. O caso adiabático se aplica ao escoamento rápido de vapor através de tubo isolado; já o isotérmico, para tubo não isolado e mantido a temperatura constante.

Em escoamentos adiabáticos tem-se que a velocidade de saída do tubo é menor que a velocidade sônica. O fluido é submetido a um gradiente de pressão ao longo do tubo, promovendo sua expansão e consequente aumento de energia cinética. Acrescentando as forças de atrito com a parede do tubo, este processo pode elevar ou diminuir a temperatura.

O balanço de energia do fluido pode ser determinado pela equação de Bernoulli modificada:

$$\frac{dP}{\rho} + \frac{\bar{u}d\bar{u}}{\alpha g_c} + \frac{g}{g_c}dz + dF = -\frac{\delta W_s}{m} \tag{3.1}$$

Onde:

dP = diferencial de pressão

ρ = densidade do fluido

u= velocidade média instantânea do fluido

g_c= constante gravitacional

α= fator de correção de velocidade (α=0.5 para escoamento laminar; α=1 para *plug flow* e $\alpha \rightarrow 1$ para escoamento turbulento)

dz = diferencial da coordenada vertical (altura acima do ponto de partida)

dF= termo de perda líquida de atrito

W_s= trabalho de eixo

m= vazão mássica

O fluxo de massa G é obtido por, Crowl e Louvar (2002):

$$G = \sqrt{\frac{2g_c M}{R_g}\frac{\gamma}{\gamma - 1}\frac{T_1 - T_0}{(T_0/P_0)^2 - (T_1/P_1)^2}} \tag{3.2}$$

onde:

M = massa molar

T = temperatura (subíndice 0 refere-se ao ponto inicial e 1 ao ponto final)

R_g= constante de gases ideais

$\gamma = C_p/C_v$ a razão entre as capacidades caloríficas

Em escoamentos isotérmicos assume-se que a velocidade do gás é bem menor que a sua velocidade sônica e é o gradiente de pressão que promove o transporte do gás através do tubo. Conforme o gás se expande, a velocidade aumenta para manter a mesma vazão mássica. A pressão no final do tubo é igual à ambiente e a temperatura é mantida constante.

O fluxo de massa pode ser obtido pela Equação 3.3, sendo L o comprimento do tubo, d seu diâmetro interno, P a pressão (subíndice 0 refere-se ao ponto inicial e 1 ao ponto final) e f o fator de atrito de Fanning:

$$2ln\frac{P_0}{P_1} - \frac{g_c M}{G^2 R_g T}(P_0^2 - P_1^2) + \frac{4fL}{d} = 0 \tag{3.3}$$

3.2 Modelos de dispersão

Durante um acidente, pode haver a rápida liberação de materiais tóxicos e em quantidades suficientes para formar uma nuvem perigosa para toda a área industrial e para a comunidade local. Sendo assim, são usados modelos de dispersão tóxica para estimar os efeitos de um vazamento para a planta e para o meio ambiente ao redor da mesma.

Esses modelos são elaborados em três etapas. A primeira é identificar a fonte de um possível vazamento, em seguida desenvolver um modelo fonte que descreva o seu comportamento e sua taxa de liberação; e, por fim, estimar a concentração do material tóxico a partir do local do incidente em direção à planta ou à comunidade usando um modelo de dispersão.

A distribuição da concentração do gás na atmosfera pode ser descrita em função do tempo e do espaço à medida que ocorram a dispersão e o transporte convectivo.

A dispersão dos gases é conduzida pelas equações de transporte de massa, energia e quantidade de movimento, envolvendo processos de convecção e difusão. Sendo assim, depende de fatores como taxa de liberação, área de abertura, características do fluido liberado e altura do vazamento em relação ao nível do solo.

Poluentes gasosos ao serem descarregados na atmosfera sofrem influência dos ventos em grande escala com o transporte em si, e em pequena escala com a turbulência que promove a diluição desses gases com o ar puro (Fleck, 2008).

O aumento da velocidade do vento interfere no formato da pluma tornando-a mais estreita e comprida, a substância é mais rapidamente levada a favor do vento, porém é diluída por uma maior quantidade de ar.

A estabilidade atmosférica afeta a dispersão por estar relacionada com a mistura vertical do ar. A temperatura do ar diminui rapidamente durante o dia com o aumento da altura, favorecendo a difusão vertical. À noite este fenômeno é reduzido, pois a temperatura cai menos. Porém, algumas vezes, ocorrem inversões térmicas.

Existem três principais classes de estabilidade atmosférica: instável, neutra e estável. Para condições instáveis, o sol aquece o solo mais rapidamente que o calor possa ser removido e assim, o ar próximo à superfície fica mais quente que em alturas elevadas. A instabilidade ocorre porque o ar de baixa densidade fica abaixo do de alta densidade, acarretando maior turbulência.

Na estabilidade neutra, o ar acima do solo aquece e a velocidade do vento aumenta, reduzindo a insolação. E, em condições atmosféricas estáveis, o sol não consegue aquecer o solo tão rapidamente como este é resfriado, e a temperatura próxima à superfície fica menor.

As classes de estabilidade são subdivididas em 6 diferentes condições atmosféricas, conforme apresentadas na Tabela 7, que dependem da velocidade do vento e da luz solar. Durante o dia, a velocidade do vento aumenta proporcionando uma maior estabilidade atmosférica, ao passo que à noite, o inverso ocorre.

Tabela 7: Classes de estabilidade atmosférica de Pasquill (Turner, 1970 *apud* Soares, 2006)

Velocidade do vento v_0 (m/s) a 10 m de altitude (z_0=10)	Período diurno Grau de insolação			Período noturno Grau de nebulosidade	
	Forte	Média	Fraca	Parcialmente encoberto	Encoberto
$v_0 \leq 2$	A	A – B	B	-	-
$2 < v_0 \leq 3$	A – B	B	C	E	F
$3 < v_0 \leq 5$	B	B – C	C	D	E
$5 < v_0 \leq 6$	C	C – D	D	D	D
$v_0 > 6$	C	D	D	D	D

Classes de Estabilidade:

A – extremamente instável

B – moderadamente instável

C – levemente instável

D – estabilidade neutra

E – levemente estável

F – estável

Segundo Lisboa (2007) a estabilidade da atmosfera é a sua tendência a resistir ou intensificar o movimento vertical. O grau de turbulência na baixa atmosfera depende fortemente do gradiente vertical da temperatura, além dos efeitos da rugosidade do terreno, velocidade do vento e viscosidade. A variação vertical de temperatura é muito mais relevante que a horizontal, acarretando os movimentos verticais de ar na atmosfera.

Uma atmosfera é considerada estável quando seu gradiente térmico vertical é inferior ao gradiente vertical da adiabática seca. Esta condição é caracterizada por vento entre fraco e moderado e céu claro. Quando uma partícula é liberada nesta condição e é deslocada para outra altura, ela tende a retornar ao nível inicial (ver Figuras 9 e 12).

Entende-se por gradiente vertical da adiabática seca o fenômeno de expansão ou compressão do ar seco ou úmido em que um volume de ar quando elevado a altura maior, encontrando pressão reduzida, se expande e, por conseguinte, se

resfria. Já o gradiente térmico vertical é a distribuição atual da temperatura na vertical, consistindo no decréscimo da temperatura com a altura dentro de uma atmosfera em repouso. Conforme Furtado (2012) o gradiente térmico adiabático da atmosfera terrestre medido nos trópicos é de aproximadamente 6,5 K/km.

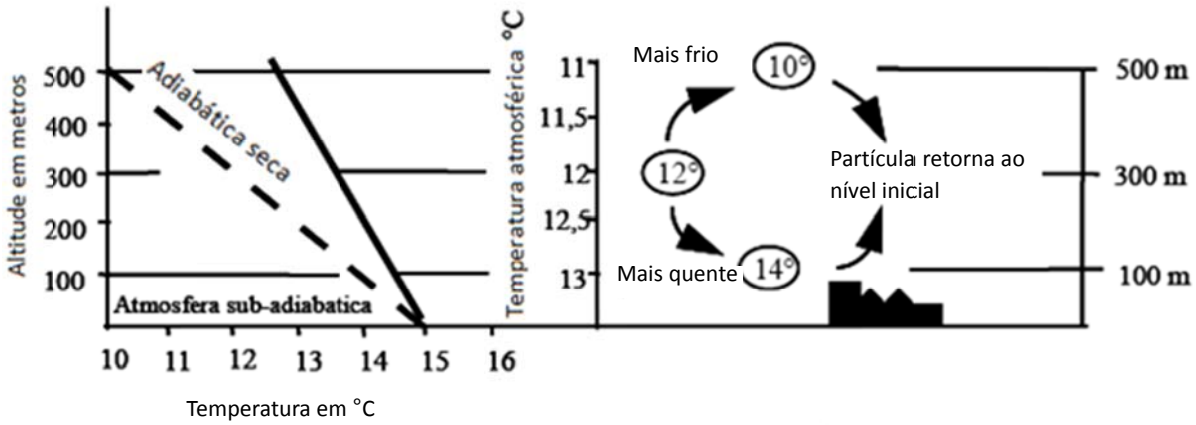


Figura 9: Atmosfera estável (Detrie, 1969 *apud* Lisboa,2007)

Quando o gradiente térmico vertical for maior que o gradiente adiabático seco, a atmosfera estará em condições de instabilidade. Se uma partícula for liberada nesta condição e deslocada, ela tenderá a seguir seu movimento, de ascenção ou decaimento. Esta condição também é caracterizada por vento entre fraco e moderado, forte intensidade de radiação solar, temperatura elevada e céu claro, como pode ser visto nas Figuras 10 e 12.

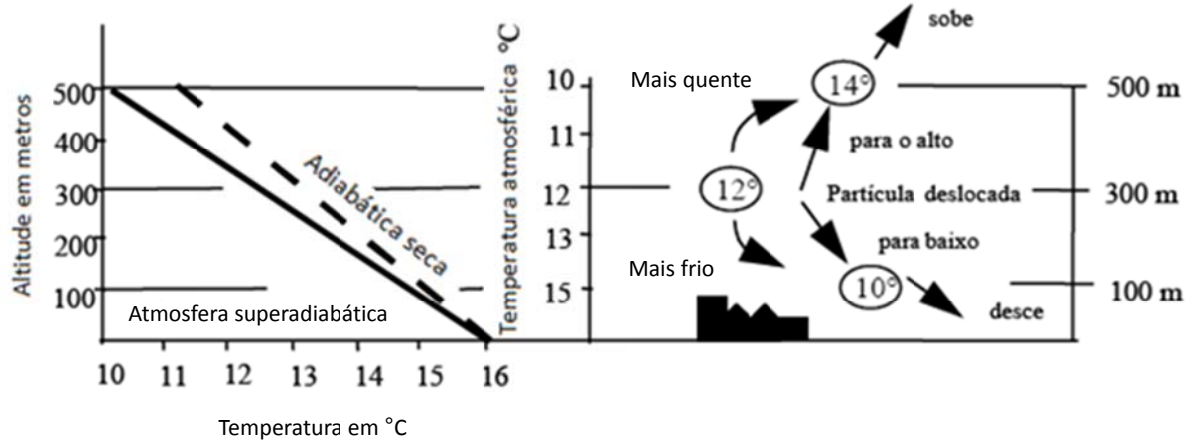


Figura 10: Atmosfera instável (Detrie, 1969 *apud* Lisboa,2007)

Se o gradiente térmico vertical for muito próximo do gradiente adiabático seco, a atmosfera será considerada neutra. Nesta condição, uma partícula liberada na atmosfera não tem a tendência de continuar seu movimento: tende a permanecer na mesma posição, conforme mostrado nas Figuras 11 e 12. Ventos fortes e alta

nebulosidade são característicos da atmosfera neutra.

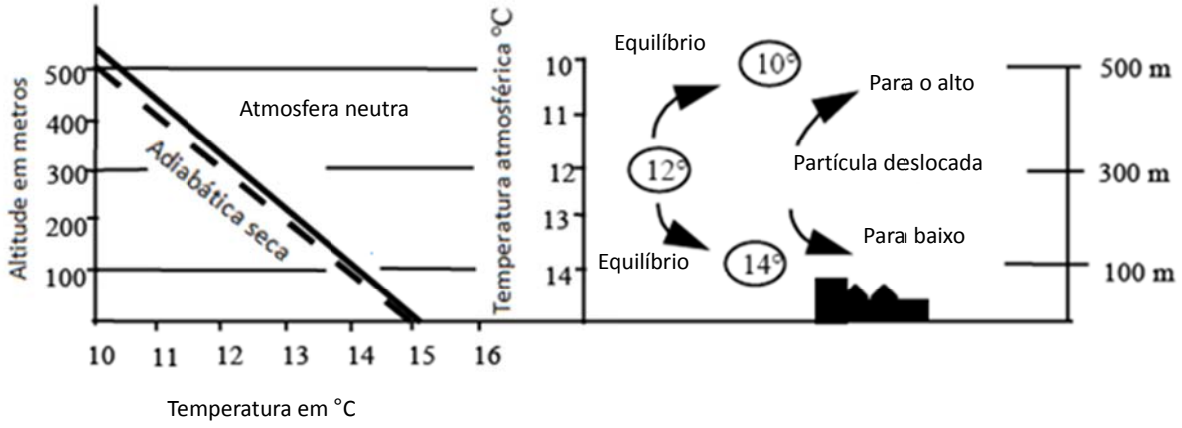


Figura 11: Atmosfera neutra (Detrie, 1969 *apud* Lisboa,2007)

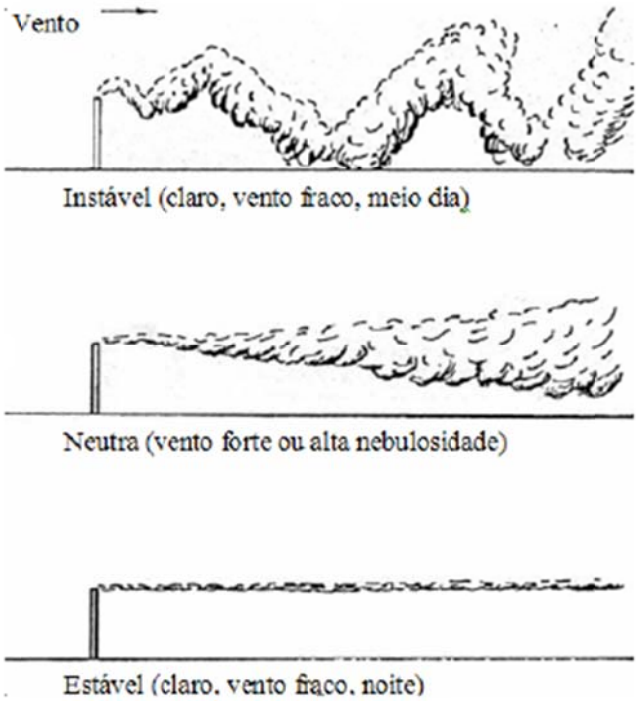


Figura 12: Condições de Dispersão Atmosférica (Turner, 2002 *apud* Soares, 2006)

Normalmente a temperatura diminui com o aumento da altitude. A superfície terrestre aquece o ar mais próximo a ela que se expande tornando-se menos denso que o ar mais frio acima dele, permitindo sua ascensão. Esse processo se repete proporcionando o movimento vertical do ar na atmosfera. Todavia, devido a condições meteorológicas, principalmente em locais cercados por montanhas e no período do inverno, ocorre o fenômeno chamado de inversão térmica.

Neste caso, ocorre uma inversão no gradiente normal de temperatura da troposfera e a superfície resfria rapidamente criando uma camada de ar frio que fica retida por uma camada de ar quente localizada acima, como mostrado na Figura 13 (Lisboa, 2007).

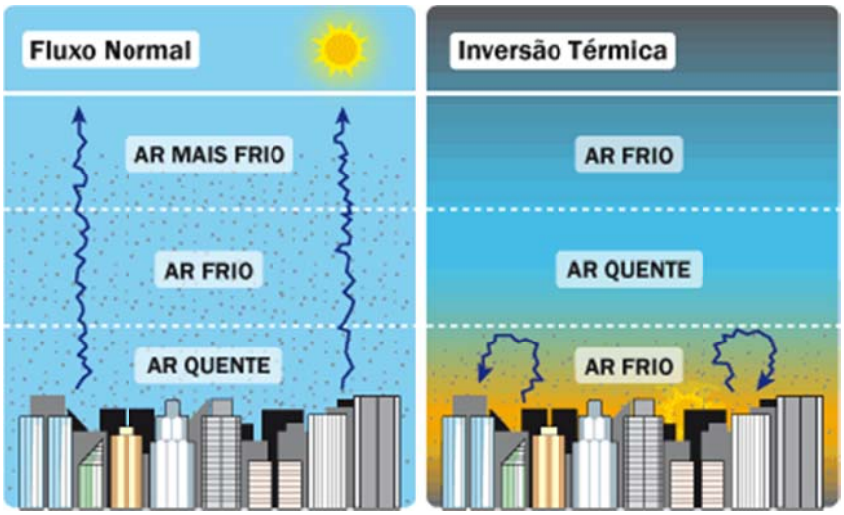


Figura 13: Gradiente de temperatura normal da atmosfera e Inversão térmica (http://ambiente.hsw.uol.com.br/inversao-termica.htm)

Este fenômeno retém os poluentes que seriam dispersos com a ascensão do ar quente, prejudicando a qualidade do ar ambiente e ainda é capaz de agravar os impactos de acidentes com liberação de compostos tóxicos.

Segundo ABNT NBR-8969 (1985) o gradiente térmico é a relação da variação da temperatura em função do aumento da altitude, normalmente negativo para decréscimo da temperatura. Se o processo de expansão ou compressão do ar na atmosfera for adiabático, a variação de temperatura será de aproximadamente 1ºC a cada 100 metros (Lisboa, 2007)

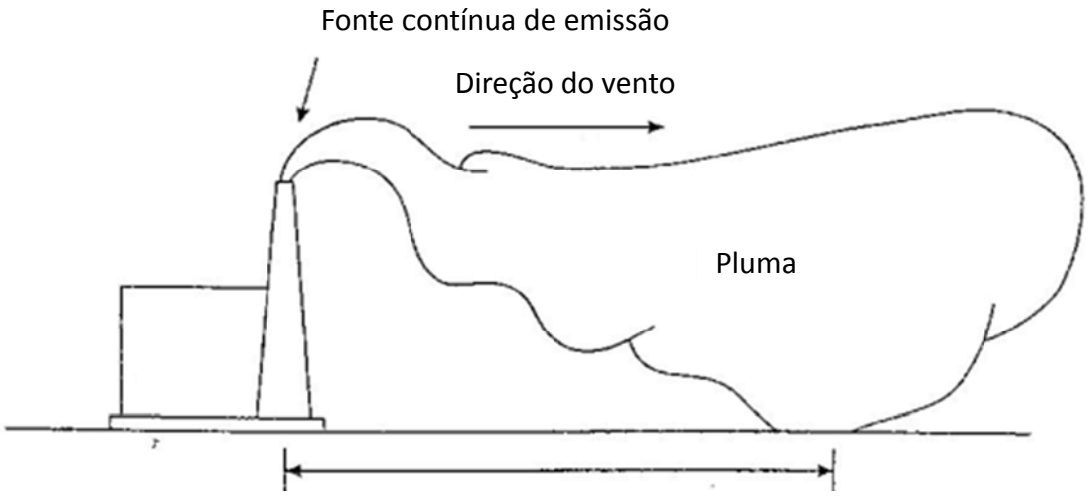
Muraleedharan, Mohankumar e Sivakumar (2013) estudaram as inversões nas camadas baixas da troposfera e indicaram que a diferença de temperatura dentro da inversão invariavelmente se encontra na faixa de 1°C.

As características do relevo influenciam o mecanismo de mistura na superfície, a camada limite e o perfil do vento em função da altura. Obstáculos como morros e terrenos irregulares aumentam a turbulência enquanto áreas abertas e a proximidade de corpos d'água a diminuem (Fleck, 2008 e Crowl e Louvar, 2002). Vales podem limitar o movimento horizontal e a dispersão, e estimular correntes de drenagem. E neste caso, a turbulência horizontal pode diminuir consideravelmente à noite. Terrenos inclinados podem alterar os movimentos de subida e descida referentes às correntes de drenagem em resposta às mudanças no perfil vertical da temperatura.

(Soares, 2006)

Outro fator importante da qual a dispersão depende é a altura efetiva da emissão, que é a altura da descarga adicionada à altura esperada da elevação da pluma até a mesma alcançar uma zona em que predomine o arraste lateral pelo vento (Boçon, 1998). A Figura 14 mostra a influência da altura da emissão na distância alcançada pela pluma.

A elevação da pluma está diretamente relacionada ao perfil de velocidade do vento; à quantidade de movimento na direção vertical associada às características da emissão; ao empuxo do ar sobre o gás emitido; densidade do material disperso; às condições atmosféricas e à altura da fonte emissora. Os efeitos da turbulência e do empuxo na dispersão dos gases podem ser vistos na Figura 15.



Quanto maior a altura da emissão, maior a distância alcançada pela pluma. Essa distância aumentada leva a uma maior dispersão e menor concentração ao nível do solo.

Figura 14: Distribuição de concentração da nuvem devido à altura da fonte. Pluma formada por vazamento contínuo (Adaptada de Crowl e Louvar, 2002).

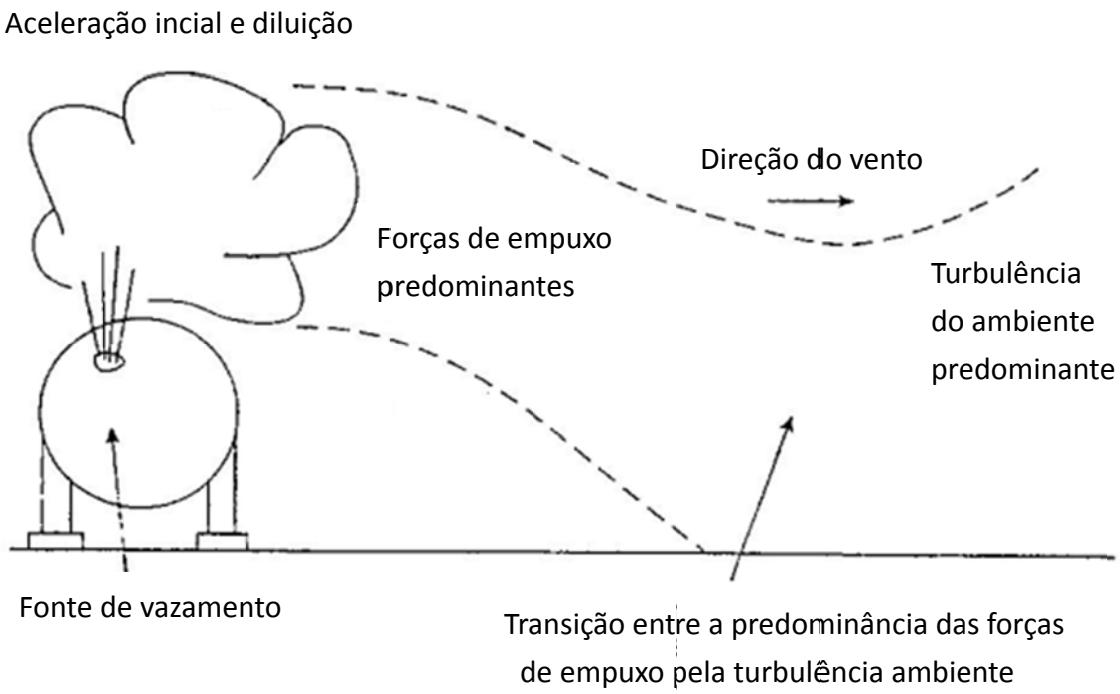


Figura 15: Influência da turbulência e empuxo na dispersão (Adaptada de Crowl e Louvar, 2002).

O *momentum* de um jato de alta velocidade carrega o gás para um ponto acima de onde foi liberado, resultando em maior altura efetiva. Se o gás for menos denso que o ar ele se erguerá levemente e se for mais pesado, descerá. A temperatura e a massa molar determinam a densidade relativa do gás ao ar. Vapor a uma temperatura superior à temperatura ambiente do ar alcançará uma altura maior devido ao empuxo.

A altura da descarga afeta significativamente a concentração no nível do solo. Com o aumento da altura, esta concentração pode ser reduzida, pois a pluma deve ter uma maior dispersão vertical.

Quando a mistura turbulenta torna-se o efeito dominante na dispersão e os gases liberados são mais densos que o ar, a pluma tende a escoar para baixo (Fleck, 2008).

Os modelos de dispersão estimam as concentrações dos gases à medida que os mesmos são misturados ao ar puro até o ponto onde a mistura resultante passa a sofrer predominantemente o arraste horizontal do vento em relação ao movimento vertical determinado pelo empuxo.

O transporte dos gases pode se dar de duas maneiras características: a Pluma (Figura 14) e o *Puff* (Figura 16)

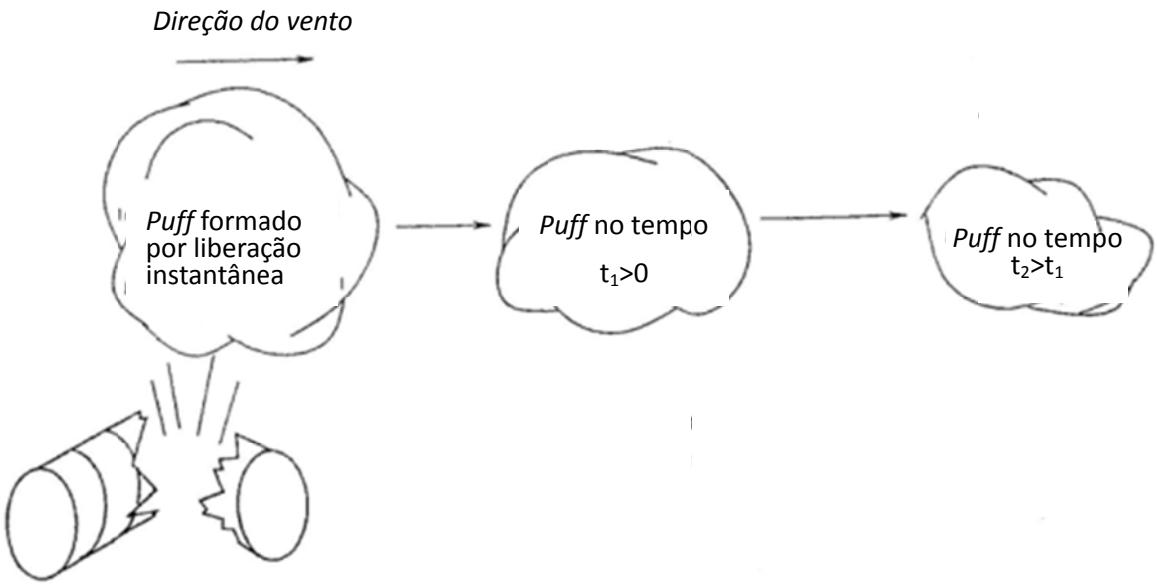


Figura 16: *Puff* formado por vazamento instantâneo (Adaptada de Crowl e Louvar, 2002)

O modelo de pluma descreve a concentração no estado estacionário de material liberado por uma fonte contínua. Já o modelo de *puff* retrata a concentração temporal de uma quantidade fixa de massa emitida por uma única fonte.

Um exemplo típico para o modelo de pluma é a emissão contínua a partir de uma chaminé; e para o modelo de *puff*, a ruptura de um vaso de pressão liberando quantidade fixa de material.

O modelo de *puff* pode ser usado para descrever a pluma, considerando-a como *puffs* consecutivos. No entanto, seu uso é recomendado para o caso de pluma dinâmica (que sofre efeito da mudança de direção do vento, por exemplo).

Uma equação que descreve a concentração (C) dos gases liberados em função da distância e do tempo (t) pode ser obtida levando-se em consideração a liberação instantânea de quantidade fixa de matéria ($Q*m$) em expansão infinita no ar; a não ocorrência de reações químicas ou difusão molecular e tendo o local da fonte como ponto de origem do sistema de coordenadas:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (u_j C)}{\partial x_j} = 0 \qquad (3.4)$$

onde u_j é a velocidade do ar e o subíndice j refere-se ao somatório das direções x, y e z.

Se fosse possível especificar a velocidade em cada direção em função do tempo e da posição, incluindo os efeitos de turbulência, a equação descreveria mais

precisamente a concentração. Entretanto, como simplificação utiliza-se a velocidade média do vento.

A Figura 17 mostra o sistema de coordenadas usado nos modelos de dispersão. O ponto (x,y,z) = (0,0,0) é a fonte do vazamento.

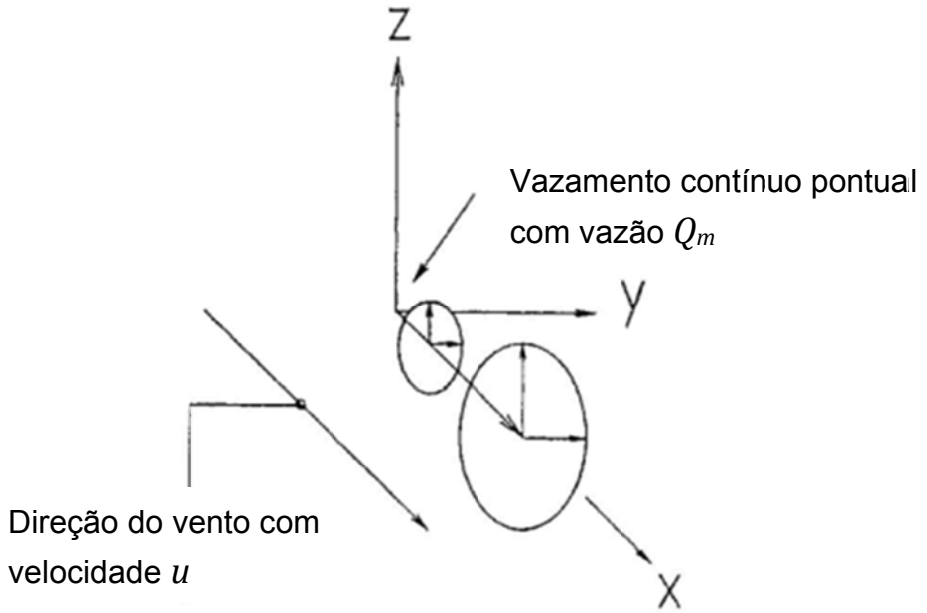


Figura 17: Fonte contínua em estado estacionário com vento. Coordenada x é a direção do vento (Adaptada de Crowl and Louvar, 2002).

A partir do modelo base podem ser estudados diversos casos de vazamentos: contínuos e instantâneos com ou sem vento; em estado estacionário ou transiente; com difusividade constante ou variável com as direções; com fonte localizada no solo ou a uma determinada altura, dentre outros cenários.

Como o estudo em questão visa a dispersão de gases de tochas, seguem as descrições das equações de balanço e condições de contorno para o cálculo da concentração da nuvem emitida por vazamento contínuo.

Segundo Crowl e Louvar (2002), para um vazamento contínuo em estado estacionário com vento, as condições aplicáveis são:

- Vazamento contínuo pontual (Qm = constante)
- Com vento apenas na direção x ($\langle u_j \rangle = \langle u_x \rangle = u = \text{constante}$)
- Difusividade constante em todas as direções ($K_{AB} = K^*$)

$$\frac{u}{K^*}\frac{\partial\langle C\rangle}{\partial x} = \frac{\partial^2\langle C\rangle}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\langle C\rangle}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\langle C\rangle}{\partial z^2} \tag{3.5}$$

A condição de contorno aplicada, considerando $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$, é:

$$r \to \infty, \langle C\rangle \to 0$$

A equação obtida em coordenadas cartesianas é:

$$\langle C\rangle(x,y,z) = \frac{Q_m}{4\pi K^*\sqrt{x^2+y^2+z^2}} exp\left(-\frac{u}{2K^*}(\sqrt{x^2+y^2+z^2} - x)\right) \tag{3.6}$$

Se for assumida uma pluma estreita, pode-se considerar a expressão:

$$\langle C\rangle(x,y,z) = \frac{Q_m}{4\pi K^* x} exp\left(-\frac{u}{4K^* x}(y^2+z^2)\right) \tag{3.7}$$

Ao longo do eixo central, $y = z = 0$:

$$\langle C\rangle(x) = \frac{Q_m}{4\pi K^* x} \tag{3.8}$$

Ao assumir que a fonte de emissão encontra-se a uma altura Hr do solo, impõe-se um limite impenetrável a uma determinada distância Hr da fonte.

$$\begin{aligned}\langle C\rangle(x,y,z) = &\frac{Q_m}{4\pi x\sqrt{K_y K_z}} exp\left(-\frac{uy^2}{4K_y x}\right) \\ &* \left\{exp\left[-\frac{u}{4K_z x}(z-H_r)^2\right] + exp\left[-\frac{u}{4K_z x}(z+H_r)^2\right]\right\}\end{aligned} \tag{3.9}$$

Análise das piores condições e limitações do modelo

Para a dispersão do tipo pluma, a pior situação, ou seja, a maior concentração de gases é encontrada no ponto de liberação dos mesmos. Se a fonte estiver ao nível do solo esta concentração estará em um ponto a favor do vento a partir do lançamento. Já para o *puff*, o ponto está no centro do *puff* formado e com a fonte ao nível do solo, este ponto irá se mover paralelamente ao solo e o teor máximo estará logo abaixo do centro do *puff* (Crowl e Louvar, 2002).

Quanto às condições metereológicas, o pior caso é obtido com maior estabilidade e velocidade do vento. Quando as condições climáticas não são conhecidas, a EPA sugere a utilização da estabilidade F e velocidade de vento tão baixa quanto 1,5 m/s. Alguns analistas de risco consideram 2 m/s.

O Modelo de Pasquill-Gifford ou gaussiano é limitado, pois deve ser aplicado somente para dispersões em que a mistura turbulenta é predominante e para distâncias entre 0,1 e 10 km a partir do ponto de liberação. As concentrações preditas pelos modelos gaussianos são médias temporais, sendo assim é possível que haja concentrações locais instantâneas superiores ou inferiores às médias calculadas (Crowl e Louvar, 2002).

Dispersão de gases densos

Quando o gás tem densidade maior que a do ar ambiente e é disperso conforme um *puff*, a nuvem formada tem dimensões similares na vertical e na horizontal. A nuvem densa inicialmente desce sob a influência da gravidade, aumentando seu diâmetro e reduzindo sua altura, e em seguida eleva-se devido aos efeitos turbulentos do ar que se tornam predominantes.

Britter e McQuaid *apud* Crowl e Louvar (2002) desenvolveram um modelo para descrever dispersões de nuvens densas, porém baseiam-se em dados de áreas rurais e terreno preponderantemente plano e aplicável somente para estes casos. Primeiramente deve ser verificado se o modelo de gás denso é aplicável, o passo seguinte é determinar se o vazamento é contínuo ou instantâneo e por fim, utilizam-se correlações propostas para a designação da máxima concentração. Ressalta-se o fato deste modelo ser incapaz de contemplar parâmetros como altura de lançamento, rugosidade do solo e perfis de velocidade do vento.

A Figura 15 indica que as características de um vazamento, seja ele do tipo *puff* ou pluma, dependem de um *momentum* inicial e do empuxo que age sobre os gases liberados. Esses fatores interferem na altura efetiva do vazamento, como pode ser visto na Figura 18 para uma liberação usual de uma chaminé.

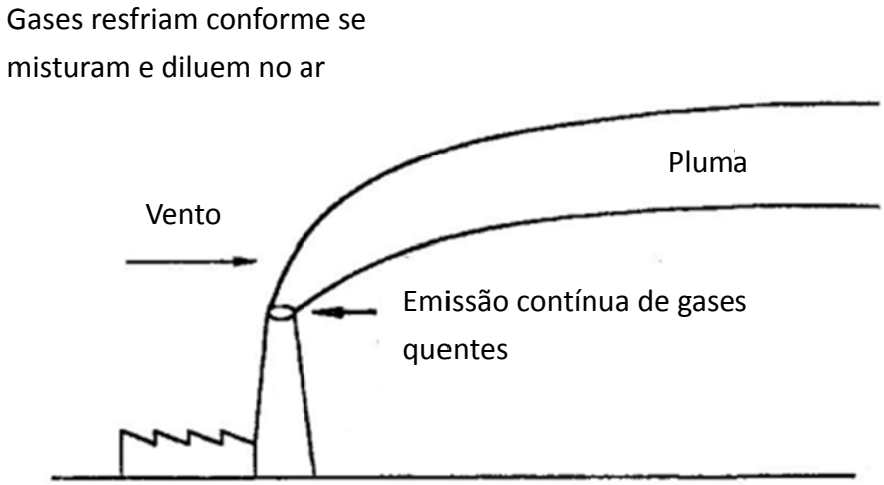


Figura 18: Pluma liberada por chaminé demonstrando sua elevação devido à alta temperatura dos gases (Adaptada de Crowl e Louvar, 2002)

No caso do material liberado pela chaminé, este contém *momentum* devido à velocidade ascendente dentro do tubo; e também tem leveza por causa da temperatura superior à temperatura ambiente do ar. O alcance da nuvem pode ser reduzido à medida que o material é resfriado e o *momentum* dissipado.

Turner *apud* Crowl and Louvar (2002) propôs uma fórmula de correção da altura do vazamento considerando os efeitos descritos acima:

$$\Delta H_r = \frac{u_s d}{u}\left[1.5 + 2.68 * 10^{-3} P d \left(\frac{T_s - T_a}{T_s}\right)\right] \quad (3.10)$$

onde u é a velocidade do vento (m/s), u_s é a velocidade de saída do gás do tubo (m/s), P a pressão atmosférica (mbar), Ts é a temperatura do gás no tubo (K) e Ta a temperatura do ar (K).

Para vapores mais pesados que o ar, o material inicialmente cai em direção ao solo até que ele se dispersa o bastante para reduzir a densidade da nuvem.

Considerando fontes pontuais as que se referem a emissores isolados e localizados, como o caso de chaminés, é comum a utilização de modelos de pluma gaussiana para a descrição da dispersão de gases por estas fontes.

É fato que as características da pluma variam com o tempo, já que dependem de condições meteorológicas e da emissão. No entanto, mesmo representando uma média temporal, a fórmula da dispersão da pluma gaussiana é invariante no tempo.

Estes modelos são simplificados com base empírica, podendo gerar resultados que não refletem precisamente a realidade (Taiao, 2004).

A concentração de poluentes, segundo os modelos de pluma gaussiana, pode ser representada como uma distribuição normal bidimensional no plano (yz) ortogonal ao eixo x, central da pluma, conforme apresentado na Figura 19.

Mesmo sendo esse modelo bem simplificado, ele pode ser aplicado adequadamente em determinados casos, devido ao fato dos coeficientes de dispersão do modelo serem obtidos a partir de concentrações medidas em experimentos reais de dispersão atmosférica. Dados medidos no campo consideram os efeitos locais de rugosidade e topografia do terreno, turbulência e estabilidade atmosférica proporcionando resultados mais precisos (Boçon, 1998).

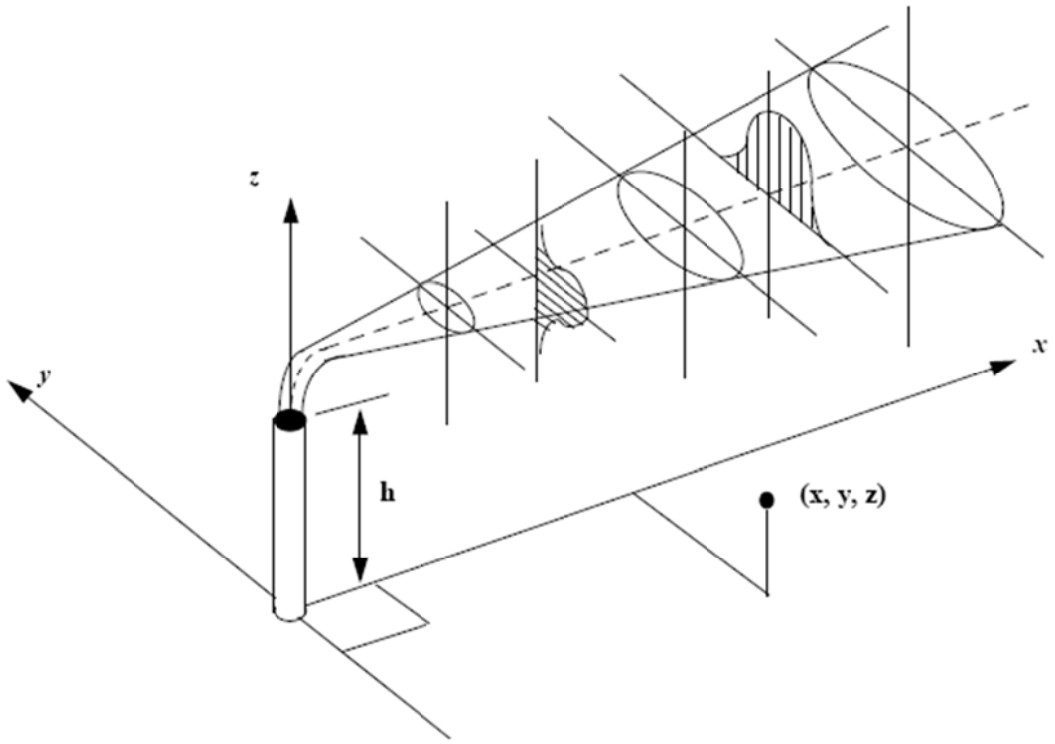


Figura 19: Distribuições Normais de Concentração nos Eixos z e y, Ortogonais ao eixo de Propagação da Pluma (x) em Modelos de Pluma Gaussiana (Lisboa, 2007).

3.3 Fluidodinâmica computacional (CFD)

A fluidodinâmica computacional (CFD) é uma forma de resolução numérica dos processos físicos e/ou físico-químicos envolvidos em um escoamento. Através de modelos matemáticos diferenciais baseados nas equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento consegue-se predizer perfis de concentração, velocidade, temperatura, pressão e propriedades turbulentas de um fluido escoando em determinados espaço e período de tempo (Fleck, 2008).

Quando o escoamento estudado é simples, o problema é solucionado analiticamente; entretanto, para problemas reais com maior complexidade, faz-se necessário o uso de métodos numéricos.

A crescente utilização de CFD para a estimativa do comportamento de determinados escoamentos está pautada em motivos como: estudos que envolvem riscos quanto à realização experimental; quando o experimento se torna excessivamente caro e de difícil elaboração; em casos em que a simulação numérica oferece mais detalhes que experimentos reais; minimização de custos e tempo com relação a experimentos reais, dentre outros.

Entretanto, Gomes (2012) ressalta que o uso desta ferramenta não retira a importância da análise teórica e da necessidade de realização de procedimentos experimentais. Pode-se utilizar uma solução analítica simplificada como condição inicial de simulações complexas e os resultados experimentais servem para validação numérica do modelo e desenvolvimento de novos modelos. Dessa forma, CFD e experimentos devem ser vistos de maneiras complementares no estudo de escoamentos.

Existem diversos programas e pacotes computacionais para a solução destes problemas com diferentes implementações numéricas e tratamentos gráficos, porém todos seguem uma sequência pré-estabelecida de etapas para a obtenção da solução, conforme pode ser vista na Figura 20:

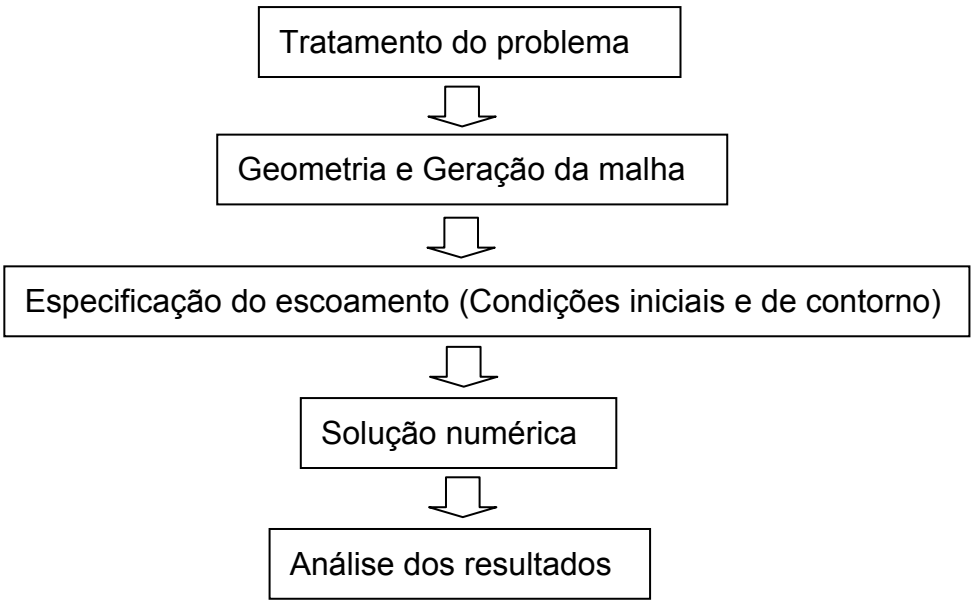


Figura 20: Etapas de solução em fluidodinâmica computacional.

As três primeiras etapas são classificadas como pré-processamento. No tratamento do problema são determinadas as grandezas que atuam sobre o sistema por meio do entendimento teórico do problema, selecionando os fenômenos físicos e químicos que precisam ser modelados e definindo as propriedades dos fluidos.

Define-se, então, a geometria da região e faz-se a discretização do domínio, gerando a malha computacional. Segundo Fleck (2008), é importante selecionar quais objetos da geometria serão resolvidos explicitamente pela malha do CFD e quais serão ignorados, além de identificar os pequenos objetos, cujos efeitos no escoamento devem ser levados em consideração. Estes, no entanto, não são atualmente práticos de serem resolvidos pelo grid, necessitando de uma representação dada por modelagem de sub-malha.

Em seguida, escolhe-se a melhor estratégia para a resolução, especificando as condições iniciais e de contorno, simplificações para o problema, precisão da resposta, número máximo de iterações, dentre outras escolhas.

Dessa forma chega-se ao processamento, resolvendo-se iterativamente o problema de acordo com o algoritmo do programa utilizado. Com o domínio discretizado, as equações são calculadas em cada ponto e as soluções numéricas são obtidas. Também é possível selecionar critérios de convergência nesta etapa.

Os métodos numéricos seguem alguns passos para a obtenção da solução: Aproximação de variáveis desconhecidas por variáveis médias com o uso de funções simples; as equações fundamentais do escoamento são discretizadas e são feitas manipulações matemáticas pertinentes; em seguida faz-se a linearização do sistema de equações algébricas resultantes e obtém-se a solução desse sistema linearizado

(Versteeg e Malalasekera, 1995).

A análise dos resultados constitui o pós-processamento, no qual são obtidos resultados pontuais, vetoriais e até com animações gráficas facilitando a compreensão do escoamento na simulação. Consegue-se visualizar a geometria, a malha, gráficos de vetores e de contornos, gráficos sobre superfícies tridimensionais, linhas de correntes e trajetória de partículas (Santos, 2007 *apud* Fleck, 2008).

No *software* CFX da ANSYS, versão 13.1, utilizado neste trabalho, o método de cálculo é por volumes finitos e os principais elementos que compõem o programa são: DESIGN MODELER e CFX MESHING (gerador de geometria e malha), CFX-PRE (pré-processador com definição das condições de contorno e informações do escoamento), CFX-SOLVER (processador ou *solver*) e o CFX-POST (pós-processador).

3.3.1 Malha computacional

A malha computacional é gerada com a discretização do domínio, ou seja, a subdivisão do domínio em infinitos pontos (nós) aonde as equações são resolvidas. Existem diversas formas geométricas utilizadas para a geração da malha (*grid* ou *mesh*) em CFD. Ver Figura 21.

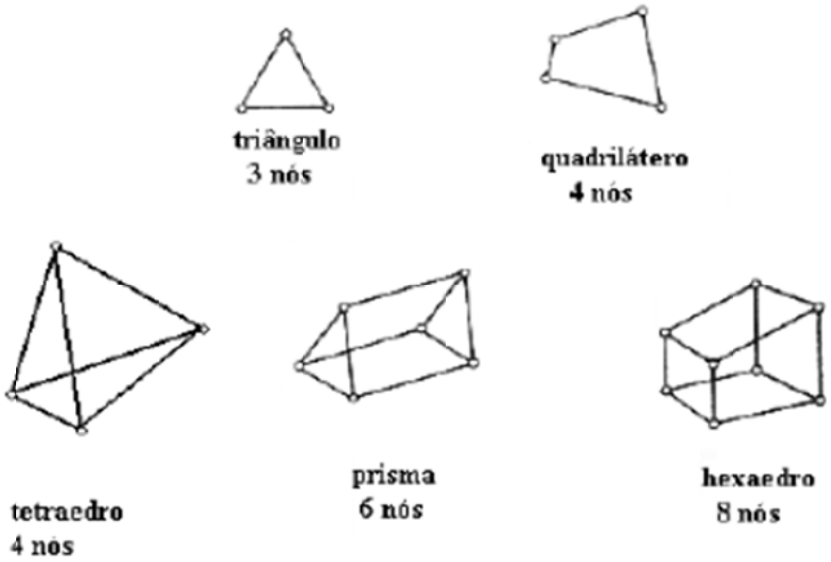


Figura 21: Formas geométricas mais comumente utilizadas na geração de malhas em CFD (Pfluck, 2010)

Como as equações algébricas serão resolvidas em cada nó do domínio e seus resultados transmitidos aos nós vizinhos, se houver uma variação significativa da

variável em determinada região, é necessário um refinamento da malha nesta área a fim de não prejudicar a solução numérica com a perda de informações.

A disposição, tamanho e ordenação do volume de controle influenciam a qualidade e rapidez da obtenção da solução do problema (Pfluck, 2010).

Quanto maior o número de nós de uma malha, os resultados são mais precisos, pois cada subdivisão do volume tende cada vez mais a um valor infinitesimal, no entanto, é requerido um esforço computacional muito maior, acarretando o aumento demasiado do tempo de processamento. Em especial para os casos de dispersão atmosférica em que os domínios de solução são extensos.

Por outro lado, se a malha for grosseira pode-se chegar a resultados imprecisos ou a não convergência da solução. Portanto, a melhor opção é avaliar o fenômeno envolvido no problema e refinar a malha somente nos pontos de gradientes elevados, assim como em pontos próximos à parede para melhor representação dos efeitos de camada limite de velocidade, com o intuito de obter-se uma solução numérica rápida, precisa e representativa. Ver Figura 22.

Outra técnica utilizada com o mesmo objetivo do refinamento é a adaptação da malha, na qual ao longo das iterações os pontos são movidos de forma a aumentar a densidade da malha na região de interesse. Vale ressaltar que nesta última, o número de nós não é alterado, havendo apenas mudança na posição e no tamanho dos volumes de controle.

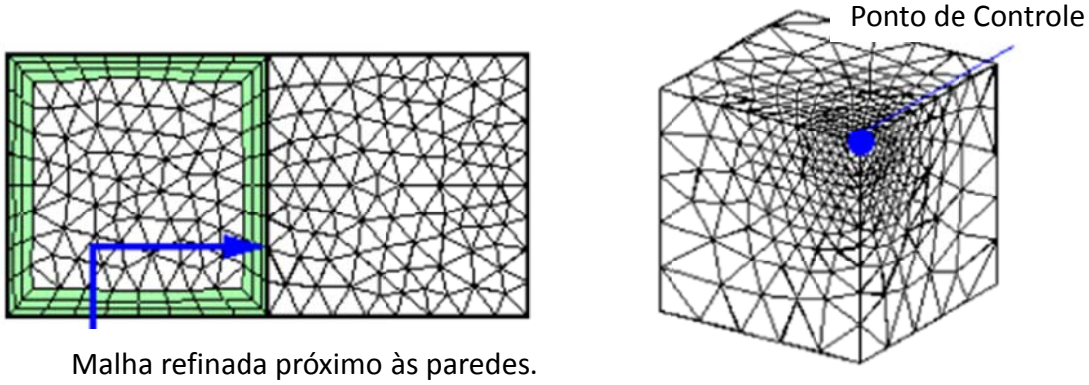


Figura 22: Exemplos de refinamento da malha próximo às paredes e em determinado ponto de controle (ANSYS Help 11.0, 2007)

Tipos de malhas

Existem os seguintes tipos de malhas: estruturadas, não-estruturadas e híbridas.

Nas malhas estruturadas os pontos estão distribuídos de maneira regular no

espaço do domínio. Essas malhas podem ser uniformes quando seus pontos estão igualmente espaçados, ou não-uniformes, quando seus pontos são espaçados de acordo com a necessidade do domínio, permitindo menor espaçamento entre os pontos em áreas de gradientes elevados e pontos mais distantes em regiões onde a solução apresenta pequena variação espacial (Fleck, 2008). São compostas por elementos quadriláteros e/ou triangulares, em geometrias 2D, e elementos hexaédricos, tetraédricos e/ou prismáticos, em geometrias 3D (Gomes, 2012).

Nas malhas não-estruturadas não há regularidade na distribuição espacial dos pontos. A distribuição dos pontos pode assumir diferentes formatos como triângulos, tetraedros, prismas, hexaedros, etc (Gomes, 2012).

De modo geral, as malhas estruturadas são mais aconselháveis para problemas com geometrias regulares, enquanto que as não-estruturadas são indicadas para geometrias irregulares e/ou mais complexas, devido à sua maior liberdade de arranjo e posicionamento dos nós. Exemplos de malhas estruturadas e não-estruturadas são mostrados na Figura 23.

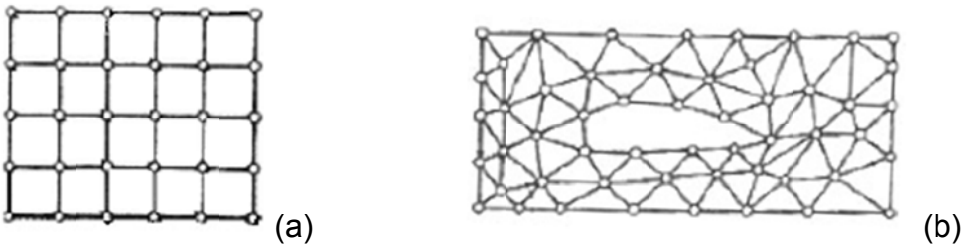


Figura 23: Malha estruturada (a) e malha não-estruturada (b) (Pfluck, 2010).

As malhas híbridas ou mistas são aquelas que contêm os outros dois tipos de malhas.

Modelagem de sub-malha

Objetos de tamanhos menores que o espaçamento da malha devem passar por uma avaliação do usuário para a determinação de quais destes devem ter seus efeitos levados em consideração e, portanto, serem resolvidos pela malha e quais devem ser ignorados. Esses efeitos ao serem modelados, implicam em incertezas adicionais (HSL, 2000, 2002 e 2003 *apud* Fleck, 2008).

Os objetos que não são resolvidos pela malha podem ser modelados usando algum tipo de aproximação de porosidade. Nesse caso, esses modelos são chamados de PDR (*Porosity/Distribuited Resistance*), ou modelos de sub-malha.

3.3.2 Método de discretização

A discretização do domínio implica na substituição das derivadas das equações diferenciais parciais por expressões algébricas, fazendo com que as equações sejam calculadas em cada ponto e as soluções numéricas sejam obtidas. Pode existir uma de três estratégias de resolução: diferenças finitas, volumes finitos ou elementos finitos. A diferença entre as três está na aproximação e no processo de discretização das equações.

O método mais utilizado em simulações de escoamento de fluidos e transferência de calor e massa, incluindo problemas de dispersão de poluentes, é o método dos volumes finitos (Pfluck, 2010). Este método satisfaz a conservação da propriedade em nível de volumes elementares, por meio de balanços da propriedade nestes volumes e integração no espaço e no tempo das equações na forma conservativa.

A interpretação física das equações resultantes, bem como a possibilidade de aplicá-las diretamente sobre os *meshes* com espaçamentos não-uniformes, em problemas 2D ou 3D, são razões que explicam a sua popularidade (Maliska, 1995).

3.3.3 Modelagem matemática

Equação da Continuidade (Conservação de massa)

A equação da continuidade pode ser escrita na forma vetorial da seguinte forma:

$$-(\nabla \,.\, \rho u) = \frac{\partial \rho}{\partial t} \tag{3.11}$$

Para um fluido incompressível, ou seja, com densidade constante, a equação da continuidade resume-se a:

$$(\nabla \,.\, u) = 0 \tag{3.12}$$

Segundo Bird *et al.* (2004), a consideração de um fluido como incompressível é muito aplicada na engenharia quando a velocidade do fluido é pequena comparada à velocidade do som (número de Mach pequeno) e resulta em significativa simplificação e erro muito pequeno.

Equação do movimento (Conservação de momento)

A equação do movimento pode ser escrita na forma a seguir, onde ρg representa as forças de campo, ∇p as forças de pressão, σ as forças viscosas e ρuu é o tensor fluxo convectivo de momento:

$$-(\nabla .\ \rho uu) - \nabla p - (\nabla . \sigma) + \rho g = \frac{\partial \rho u}{\partial t} \tag{3.13}$$

Para fluidos incompressíveis:

$$-\nabla p - (\nabla . \sigma) + \rho g = \rho \frac{Du}{Dt} \tag{3.14}$$

Pode-se escrever também a Equação de Navier-Stokes para fluidos newtonianos incompressíveis e com viscosidade constante:

$$-\nabla p + \mu \nabla^2 u + \rho g = \rho \frac{Du}{Dt} \tag{3.15}$$

Aproximação de Boussinesq para compressibilidade

A equação do movimento é válida tanto para escoamentos isotérmicos como para não-isotérmicos. Quando o escoamento é não isotérmico, a densidade e a viscosidade do fluido variam com a temperatura e a pressão. Essa variação da densidade origina as forças de empuxo, proporcionando o fenômeno da convecção natural.

A aproximação de Boussinesq consiste em considerar que para uma diferença de temperatura pequena espera-se uma variação de densidade (ρ) também pequena, permitindo expandir ρ em uma série de Taylor em torno de uma temperatura média $\bar{T}$ e mantendo apenas os dois primeiros termos da série, tem-se:

$$\rho(T) = \bar{\rho} - \bar{\rho}\bar{\beta}(T - \bar{T}) \tag{3.16}$$

onde $\bar{\rho}$ é a densidade avaliado em $\bar{T}$ e $\bar{\beta} = -\left(\frac{1}{\rho}\right)\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_p$ é o coeficiente de expansão volumétrico avaliado em $\bar{T}$. Com esta aproximação supõe-se que a densidade é costante e o fluido incompressível.

Quando essa aproximação é inserida na equação do movimento substituindo somente o termo ρg, surge a força de empuxo e obtém-se a *Equação de Boussinesq*:

$$-\nabla p - (\nabla \,.\, \sigma) + \bar{\rho} g - \bar{\rho} g \bar{\beta} (T - \bar{T}) = \rho \frac{Du}{Dt} \tag{3.17}$$

3.3.4 Modelos de turbulência

Assim como o campo de escoamento, a camada limite pode ser laminar ou turbulenta. O escoamento laminar é tipicamente ordenado, previsível e determinístico, já o turbulento é sempre tridimensional, não estacionário, randômico e caótico. No escoamento turbulento existem flutuações/turbilhões que aumentam o transporte convectivo de momento, calor e massa. É o Número de Reynolds que avalia a transição do escoamento laminar para o turbulento. Essa transição normalmente ocorre em um número de Reynolds crítico de aproximadamente 2100 para tubos (Bird *et al.*, 2004).

A turbulência atmosférica é a principal responsável pela transferência de massa durante a dispersão de gases na atmosfera. Este escoamento turbulento consiste de vórtices de diversos tamanhos que se sobrepõem uns aos outros, gerados pelos gradientes de temperatura e de velocidade do escoamento. A tensão cisalhante gerada pelo escoamento sobre a superfície terrestre contribui para a turbulência atmosférica (Pfluck, 2010).

Na maioria dos casos de engenharia não é necessário resolver os detalhes das flutuações turbulentas e apenas os efeitos da turbulência no escoamento são vistos. Os escoamentos turbulentos possuem altos números de Reynolds caracterizados por forças de inércia maiores que as forças viscosas, aumentam a difusividade, e têm caráter dissipativo uma vez que a energia cinética dos menores turbilhões é transformada em energia interna (calor), aquecendo o fluido em escoamento pela ação das tensões viscosas. Os menores turbilhões recebem energia de turbilhões ligeiramente superiores, que recebem energia de turbilhões um pouco maiores, e assim sucessivamente, até se chegar aos maiores turbilhões que extraem sua energia do escoamento médio (Gomes, 2012).

Para escoamentos turbulentos em que a velocidade flutua caoticamente com o tempo, conforme mostrado na Figura 24, pode-se considerar a velocidade real de um fluido incompressível como a soma de uma velocidade média temporal ($\overline{u_z}$) com uma flutuação (u'_z): $u_z = \overline{u_z} + u'_z$

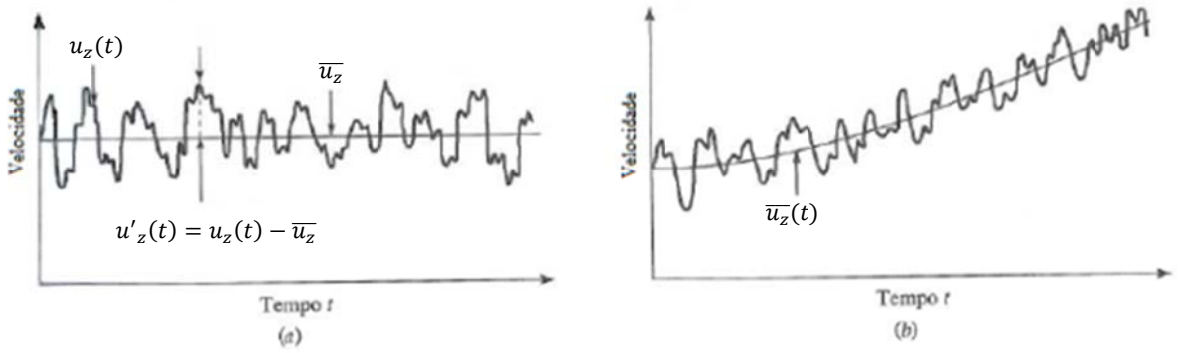


Figura 24: (a) Escoamento turbulento permanente no qual $\overline{u_z}$ não depende do tempo e (b) no qual $\overline{u_z}$ depende do tempo. (Bird *et al.*,2004)

Segundo Su, 2009 *apud* Gomes, 2012 as soluções numéricas das equações de Navier-Stokes para escoamentos turbulentos requerem números muito grandes de pontos de discretização (da ordem de 10 milhões de pontos para escoamentos simples) para que o domínio computacional inclua certo número de maiores turbilhões e que o menor turbilhão seja discretizado por um certo número de pontos e que uma alternativa seria a utilização da modelagem da média (temporal) de Reynolds permitindo considerar o escoamento turbulento como estacionário.

Para resolver problemas de escoamento desse tipo são necessárias informações experimentais sobre as tensões de Reynolds ou fazer uso de expressões empíricas ou teóricas. As equações de balanço para as tensões de Reynolds contêm grandezas correlacionadas a outras de ordem mais elevada, que por sua vez também têm correlação com grandezas de ordem mais elevada ainda, e assim por diante, sendo preciso o uso de equações empíricas para interromper a sequência de equações necessárias à solução. O problema de introduzir empirismos para obter um conjunto fechado de equações levando às distribuições de velocidades e pressões, é referido com "problema de fechamento". Como fechamento de segunda ordem, o empirismo "$k - \varepsilon$" tem sido muito estudado, sendo largamente utilizado em mecânica dos fluidos computacional (Bird *et al.*, 2004).

Segundo Alves (2012) a utilização da média temporal funciona como um filtro que remove as flutuações, permitindo o uso de malhas bem menos refinadas e, consequentemente, menor custo computacional.

Cabe ao usuário dos códigos de CFD selecionar o modelo de turbulência mais adequado à física do problema a ser modelado e à malha computacional que pode ser usada com os recursos computacionais disponíveis (Baraldi *et al.*, 2007).

Os principais modelos de turbulência usados em CFD são os baseados nas equações de Reynolds (modelos clássicos):

- modelo de equação zero - *Zero equation* (modelo de mistura);

- modelo de 2 equações (modelo $k-\varepsilon$, RNG $k-\varepsilon$ e $k-w$);
- modelo de tensões de Reynolds (SST e SSG);
- modelo algébrico de tensão.

E os modelos *Large eddy simulation* (LES) - onde as equações de escoamento dependentes do tempo são resolvidas para um fluxo médio e os maiores turbilhões e os efeitos dos menores são modelados.

Dentre os modelos clássicos, o modelo de mistura e o $k-\varepsilon$ são os mais comumente utilizados e validados, e se baseiam na premissa de analogia da ação de tensões viscosas e tensões de Reynolds no escoamento médio (Versteeg e Malalasekera, 1995). Os dois modelos assumem que a viscosidade turbulenta é isotrópica, isto é, a razão entre as tensões de Reynolds e a taxa de deformação média é a mesma em todas as direções.

Experimentalmente, observa-se em escoamentos isotérmicos incompressíveis que a turbulência decresce a menos que haja uma tensão cisalhante. Além disso, tensões turbulentas aumentam conforme o acréscimo na taxa média de deformação.

Em 1877 Boussinesq propôs que as tensões de Reynolds estariam relacionadas com as taxas médias de deformação, onde μ_t é a viscosidade turbulenta, da seguinte forma:

$$\tau_{ij} = -\rho\overline{u'_i u'_j} = \mu_t\left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i}\right) \tag{3.18}$$

Modelo $\boldsymbol{k-\varepsilon}$

No modelo $\mathrm{k}-\varepsilon$ as escalas de velocidade e de comprimento são resolvidas usando equações de transporte distintas, uma de energia cinética turbulenta (k) e outra da taxa de dissipação da energia cinética (ε) (Fleck, 2008 e Versteeg e Malalasekera, 1995).

A energia cinética instantânea $k(t)$ de um escoamento turbulento é a soma da energia cinética média Ec e a energia cinética turbulenta k. Os termos k e ε são usados para definir a escala de velocidade ϑ e escala de comprimento l que representam as maiores escalas de turbulência da seguinte maneira:

$$\vartheta = k^{1/2} \quad \text{e} \quad l = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \tag{3.19}$$

A viscosidade turbulenta pode ser descrita como $\mu_t = C\rho\vartheta l = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$ em que C_μ é uma constante adimensional (Versteeg e Malalasekera, 1995).

Segundo Prandtl *apud* Gomes, 2012 a energia cinética de flutuação turbulenta,

k, (por unidade de massa), pode ser usada como a base da escala de velocidade da forma:

$$k = \frac{1}{2}\overline{u'_\iota u'_\iota} \tag{3.20}$$

E assim tem-se que:

$$\tau_{ii}/\rho = \overline{u'_\iota u'_\iota} = 2k \tag{3.21}$$

Conforme Gomes (2012) a equação da energia cinética turbulenta (k) é dada por:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{u}_\mathrm{j} k\right) = \frac{\tau_{ij}}{\rho}\frac{\partial \overline{u}_\iota}{\partial x_j} - \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_j}\right] \tag{3.22}$$

E a equação da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ε) por:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \overline{u}_\mathrm{j}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = C_{\varepsilon 1}\frac{\varepsilon}{k}\frac{\tau_{ij}}{\rho}\frac{\partial \overline{u}_\iota}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2}\frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right] \tag{3.23}$$

Essas equações contêm cinco constantes ajustáveis e o modelo $k - \varepsilon$ padrão emprega valores para essas constantes encontrados após dados adequados a diversos escoamentos turbulentos (Versteeg e Malalasekera, 1995):

$$C_\mu = 0{,}09;\ \sigma_k = 1{,}0; C_{\varepsilon 1} = 1{,}44;\ C_{\varepsilon 2} = 1{,}92;\ \ \sigma_\varepsilon = 1{,}3$$

Segundo Versteeg e Malalasekera (1995) este é o modelo mais amplamente utilizado e validado em problemas de engenharia industrial, como por exemplo, de dispersão de poluentes na atmosfera, em lagos e na modelagem de incêndio/chama.

O modelo $k - \varepsilon$ apresenta como vantagens o fato de ser um modelo de turbulência simples, necessitando apenas de condições iniciais e/ou de contorno para ser resolvido, de ter uma boa performance para a maioria dos escoamentos industriais e ser bem desenvolvido – o modelo de turbulência mais validado. No entanto, apresenta como desvantagens ser mais custoso de implementar que o modelo de mistura e ter performance fraca para determinados casos como: alguns escoamentos não-confinados, rotativos ou completamente desenvolvidos em dutos não circulares.

Representatividade da solução numérica

Segundo Fleck (2008), para que uma solução numérica seja representativa, ela deve ter significado físico e reproduzir a realidade do escoamento, e para isto, ela deve possuir as seguintes características:

- Consistência: verifica-se a consistência de uma solução através do erro de truncamento, dado pela diferença entre a equação discretizada e a exata. Em um método consistente, quando os limites de tempo e espaço tendem a zero (malha considerada um número infinito de pontos), o erro de truncamento deve ser zero.

- Estabilidade: o método é estável se os erros ao longo do processo de solução numérica não aumentarem.

- Convergência: o método converge quando a solução numérica se aproxima da solução exata das equações diferenciais para um espaçamento da malha, tamanho de volume de controle ou de elemento tendendo a zero. É importante utilizar um tamanho de malha na qual a solução não dependa dela, impedindo que a solução mude devido a alterações na malha.

- Conservação: existem duas formas de convergência de um método iterativo: quando se atinge o critério de convergência do erro quadrático médio (RMS) das equações resolvidas, ou um critério de convergência para o fechamento do balanço das equações simuladas, baseando-se nas leis de conservação de momento, massa e energia.

- Precisão: Para uma resposta precisa devem-se avaliar os erros das soluções numéricas. Existem três tipos de erros: os erros de modelagem, consequências de suposições feitas nas derivações das equações de transporte, de simplificação da geometria, do domínio e das condições de contorno; erros de discretização, introduzidos na solução por aproximações do sistema de equações discretizadas; e erros de convergência, que são calculados pela diferença entre as soluções iterativas e exatas dos sistemas de equações algébricas.

- Viabilidade da solução: Deve haver modelos projetados especificamente para resolução de alguns fenômenos muito complexos como, turbulência, combustão, e escoamento multifásico, a fim de se obter soluções convergentes e com significado físico.

Um método numérico para ser considerado adequado e confiável deve resolver corretamente as equações diferenciais, minimizando erros e representar com fidelidade o fenômeno físico. A correta interpretação dos resultados obtidos com o método também é de extrema importância.

3.4 Análise de dispersão de gases

A abordagem do problema da dispersão atmosférica de poluentes pode ser baseada em técnicas experimentais e teóricas. No âmbito teórico existem diversos segmentos de modelagem do problema, desde modelos gaussianos até modelos de discretização com o uso de fluidodinâmica computacional.

3.4.1 Modelos gaussianos

Villasenor *et al.* (2003) realizaram um estudo da qualidade do ar para avaliar os impactos das emissões das operações *offshore* de exploração e produção de petróleo e gás da indústria mexicana. O principal objetivo deste estudo foi a elaboração de um inventário de emissões (EI) para tochas, alívios de processos, motores de combustão interna e emissões fugitivas, preciso o suficiente para a tomada de decisões políticas sobre a qualidade do ar e para a modelagem de mesoescala de poluentes atmosféricos. Outro foco deste estudo foi verificar se as emissões de SO_2 e NO_2 estavam dentro dos padrões de qualidade do ar.

Dentre as instalações *offshore* identificadas como potenciais emissores na área estão as plataformas de perfuração, de produção, recuperação e medição de petróleo bruto, estações de transbordo e plataformas de queima (*flare*). Os *flares* são uma das fontes de emissão mais importantes do indústria *offshore* do petróleo. Das quatro fontes de emissão supracitadas os *flares* liberaram aproximadamente 82% de todos os poluentes descarregados para o ar ambiente pela indústria do petróleo na região estudada (Villasenor *et al.,* 2003).

A análise química dos gases de combustão emitidos para o ar por *flares* indicou que os hidrocarbonetos não queimados (HC), óxidos de nitrogênio (NO_x), dióxido de enxofre (SO_2), monóxido de carbono (CO), sulfeto de hidrogênio (H_2S), e material particulado (MP) são os principais constituintes.

Dados de projeto juntamente com a composição por cromatografia de hidrocarbonetos e enxofre das correntes enviadas para o *flare* foram utilizados para calcular as emissões de óxidos de enxofre e dióxido de carbono. Para estimar as emissões de dióxido de carbono, foi considerado, seguindo as recomendações do Painel sobre Mudanças Climáticas International (IPCC), que 99,5% do carbono presente nas correntes de gás foi convertido em CO_2 (IPCC, 1996) durante a combustão ou processos de queima. Para as emissões de óxidos de enxofre, a conversão considerada foi de 100% do enxofre total a dióxido de enxofre.

O sistema de modelagem utilizado neste trabalho foi o CALMET / CALPUFF,

aprovado pela EPA. O CALMET é um processador meteorológico cujo principal objetivo é preparar entradas meteorológicas para a execução do sistema CALPUFF. O CALPUFF é um modelo de dispersão gaussiano não-estacionário, multi-camadas e multi-espécies que pode simular os efeitos do tempo e espaço em diferentes condições meteorológicas no transporte de poluentes, transformação e remoção.

Medições em duas instalações de petróleo *onshore* foram analisadas para medir o impacto da qualidade do ar na costa próxima habitada. A simulação preliminar de qualidade do ar foi realizada para observar o transporte e a dispersão de SO_2, que é o principal poluente emitido a partir dessas plataformas.

Todos os dados de monitoramento de qualidade do ar mostraram que as concentrações de SO_2 e NO_2 médias máximas em 24 h (média horária) são significativamente inferiores às toleradas pela norma reguladora mexicana.

Foi possível estimar a elevação da pluma considerando determinados parâmetros como a velocidade do vento, a altura do *flare*, a velocidade de saída da descarga, a temperatura do gás e o diâmetro da linha de descarga.

A topografia suave e a baixa superfície de fricção sobre a água dão origem a grandes taxas de dispersão de plumas *offshore* comparadas as de *onshore*.

Constatou-se que a estação seca do ano é aquela em que as plumas de instalações *offshore* são mais propensas a atingir as comunidades costeiras durante o ciclo diurno. Os resultados previstos para as concentrações de SO_2 pelo modelo CALPUFF foram menores que os encontrados nas estações de medição.

Alguns estudos utilizaram modelos gaussianos para o estudo de dispersão de gases em centros urbanos. Os poluentes mais comuns gerados por veículos são o monóxido de carbono (CO) e material particulado (MP), e a média de suas concentrações tende a ser mais elevada dependendo do ambiente local, implicando complexidades tanto topográficas quanto meteorológicas. O artigo de Tiwary *et al.* (2011) analisa o conhecimento sobre a modelagem do fluxo de ar e concentração de gases poluentes em cruzamentos de ruas. Tiwary *et al.* (2011) concluem que, apesar dos avanços em técnicas computacionais, existem lacunas de conhecimento cruciais que afetam as parametrizações utilizadas nos modelos atuais para exposição individual. As ferramentas de modelagem atuais tendem a subestimar esta exposição por causa de limitações na sua concepção e nos parâmetros empíricos empregados.

Os modelos operacionais recentes, apesar de serem computacionalmente eficientes comparados com as técnicas avançadas de CFD, não consideram devidamente algumas características-chave, tais como processos de dispersão relacionados com a configuração e forma de edifícios e movimento de tráfego em cruzamentos urbanos com os efeitos da turbulência localizada gerada, bem como da ressuspensão de partículas (Vardoulakis *et al.*, 2007).

Os modelos gaussianos já estão validados na literatura, inclusive servem como referência para comparação e validação de modelos mais simples como o estudo de Scott *et al.* (2003). Vários outros autores têm alertado sobre os modelos gaussianos de dispersão de poluentes no ar quanto às suas sensibilidades para entradas (Carrascal *et al.*, 1993), à precisão questionável (Beychok, 1979), e às limitações sobre previsão (Benarie, 1987). Por outro lado, os modelos de CFD apresentam resultados mais confiáveis que os gaussianos, como mostrado nos trabalhos referenciados no próximo item.

3.4.2 CFD

Modelos de qualidade do ar são usados para prever o transporte e a dispersão turbulenta de gases ou aerossóis após serem liberados para a atmosfera. Devido aos avanços na capacidade de armazenamento e velocidade dos computadores, tornou-se prática o uso de Fluidodinâmica Computacional (CFD) para modelagem de alguns destes cenários de dispersão de curto e médio alcance de gás, embora sejam inviáveis para simulações em tempo real por causa do tempo computacional relativamente longo.

A principal utilização de um modelo de CFD, e que tem vantagens em relação a modelos mais convencionais, tais como modelos de pluma gaussiana ou modelos de *puff* de Lagrange, é o de proporcionar informações detalhadas tridimensionais e dependentes do tempo na área próxima ao obstáculo.

Ferramentas gaussianas são amplamente utilizadas em procedimentos de análise de risco, fornecendo estimativas de dispersão rápidas e resultados normalmente confiáveis quando se descreve o fluxo de gás sem obstruções sobre um terreno plano (Reynolds, 1992; Smith, 1999). CFD é particularmente útil na modelagem de dispersão de pluma em topografias complexas (McBride *et al.*, 2001; Scargiali *et al.*, 2005; Burman, 1998 *apud* Mazzoldi *et al.*, 2008) e entre edifícios (Milliez e Carissimo, 2006; Yamada, 2004; Pullen *et al.*, 2004; Tang *et al.*, 2006).

O modelo de CFD resolve as equações de Navier-Stokes (dependentes do tempo), mas utilizando um tamanho de malha pequeno (da ordem de 1 m ou menos). Modelos CFD são especialmente úteis quando a pluma se dispersa dentro de uma matriz de obstáculos, tais como edifícios em áreas urbanas ou áreas industriais, com *piperacks*, tanques e outros tipos de obstáculos (Hanna *et al.*,2004). No passado, as avaliações de modelos de CFD com as observações de campo de dispersão eram muitas vezes dificultadas pela sua lenta execução e por problemas em manter adequada a turbulência (por exemplo, as experiências com o *software* de CFD

FEFLO® por Hanna *et al.*, 2000 *apud* Hanna *et al.*,2004). Riddle *et al.* (2004) e Sklavounos e Rigas (2004) descreveram aplicações de modelos de CFD onde os resultados das simulações foram comparados com dados experimentais.

Hanna *et al.* (2004) avaliaram a performance do modelo de CFD FLACS® com os dados experimentais de campo: Kit Fox, MUST, Prairie grass e EMU. Este modelo pode ser usado para estimar o escoamento e dispersão ao redor de prédios e outros obstáculos de elevadas rugosidades. Esses experimentos de campo que envolvem matrizes de obstáculo são: Kit Fox - ensaios com *puff* e pluma de gás denso (CO_2) em terrenos com obstáculos (Hanna and Chang, 2001), MUST - liberações de *puff* de gás-traço (marcador) de flutuação neutra (propileno) em uma matriz de 120 contêineres (Biltoft, 2001), Prairie Grass - ensaios com lançamentos contínuos de pluma de gás marcador de flutuação neutra (SO_2) em terreno plano agrícola (Barad, 1958), e EMU - experimento de túnel de vento que envolve a liberação de uma porta aberta na área do pátio de um edifício em forma de L (Hall, 1997).

As estatísticas de desempenho são muito boas, com todos os resultados dentro dos critérios de aceitação para os modelos de dispersão. Sugere-se que estes dados extensos de liberação de marcadores em matrizes com obstáculo podem ser utilizados para avaliar os outros modelos de CFD.

A avaliação centrou sobre a concentração máxima observada e prevista com um dado arco de monitoração – relativo a distância - durante um dado ensaio experimental. A utilização da concentração máxima em arcos para o exercício de avaliação do modelo é padrão para avaliações de modelos de dispersão e experimentos de campo em terreno aberto (Hanna *et al.*, 2004).

Uma distância de risco superestimada pode ocorrer (isto é, um excesso na predição de concentrações) caso a camada limite de turbulência da atmosfera seja subestimada. Hanna *et al.* (2002) e Riddle *et al.* (2004) relatam resultados semelhantes da subestimação da turbulência com outros modelos de CFD.

Um conceito para o refinamento da rede no local próximo à fonte foi desenvolvido (Gjesdal, 2000), mas os problemas com a estabilidade limitam a utilização destes algoritmos.

O desempenho do modelo FLACS® foi considerado bom dentro do critério de performance relatado em diversos exercícios de modelos. As medidas de desempenho foram coerentes entre os três experimentos de campo e do túnel de vento, e houve tendências mínimas com relação a distância.

Koopman, Ermak e Chan (1989) estudaram o comportamento de gás denso, que pode ocorrer devido a um ou uma combinação dos seguintes fatores: (1) materiais que são frios ou resfriam durante a evaporação quando são liberados, (2) sua massa molar é maior do que a do ar, (3) que estão contidos em pressão elevada e

vaporizam com a liberação; (4) reações químicas. Os processos físicos envolvidos mais importantes são a estratificação estável e a gravidade, porém as reações químicas e a termodinâmica podem também contribuir para os efeitos de gás denso, aumentando ou diminuindo a densidade da nuvem.

Os autores citam diversos exemplos de modelos de dispersão, dentre eles o FEM3® que simula a dispersão de um gás resolvendo equações dependentes do tempo e tridimensionais de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e espécies, juntamente com a equação de estado dos gases ideais. Além disso, ele pode tratar o fluxo em terrenos variáveis e em torno de obstruções, como cilindros e cubos; e é capaz de simular nuvens com estruturas complicadas tais como: os vórtices que são típicos de fluxos de gases densos, bifurcação da nuvem observada durante lançamentos de gases pesados sob ventos de baixa velocidade e condições ambientais estáveis e a deflexão da nuvem causada pelo terreno em declive.

Entretanto, existem limitações para o uso desses modelos, e muitas vezes simplificações e restrições são feitas, devido à complexidade dos mesmos.

Alerta-se que soluções numéricas necessariamente envolvem aproximações discretas (por diferenças finitas) de funções contínuas e que o projeto da rede (*mesh*) tridimensional requer o envolvimento de diversos parâmetros do fenômeno e ambiente em escalas menores e maiores, a capacidade do computador e o custo do tempo de processamento.

Mazzoldi, Hill e Colls (2008, 2011) realizaram um trabalho sobre o transporte de superfície de dióxido de carbono no campo de desenvolvimento de captura e armazenamento de carbono (CCS- *Carbon Capture and Storage*). Neste estudo, simulações por dois modelos de dispersão atmosférica (modelo gaussiano – ALOHA® 5.4 e modelo de CFD - PANACHE/PANEPR®) foram comparados, considerando parâmetros relevantes de lançamentos de CO_2 a alta pressão a partir da literatura.

Ambos os modelos foram validados com os conhecidos campos experimentais Prairie Grass e Kit Fox, seguindo as diretrizes métricas de desempenho do modelo para a dispersão atmosférica sugeridas por Hanna *et al.*, 1993 e resumidas por Chang e Hanna, 2004.

Segundo Mazzoldi *et al.*, 2008, tanto o PANACHE® quanto o ALOHA® deram bons resultados, porém o código de CFD apresentou melhor desempenho.

Tal como acontece com outros modelos de dispersão atmosférica gaussianos, o ALOHA® informa a concentração máxima atingida no domínio ao longo de um tempo médio fixado. Durante exercícios de validação esses modelos mostraram-se mais propensos a superestimar as concentrações ao nível do solo, o que oferece segurança ao se avaliar o risco devido a descargas para o meio ambiente (Bluett *et*

al., 2004).

O PANACHE® usa as equações de Navier-Stokes e modelos de turbulência, em uma abordagem baseada em volume finito, para resolver as equações diferenciais que regem massa, quantidade de movimento e transferência de energia em volumes de controle discretos, fornecido por um gerador de malhas não-uniforme o que representa a presença de obstáculos ou características topográficas (isto é, com a geração de uma malha mais fina em áreas críticas). O modelo de turbulência utilizado foi o k-ε modificado de modo a incluir os efeitos da flutuação e a condição da estabilidade da atmosfera.

A rugosidade do solo é uma outra condição de limite, que pode variar bastante com a natureza da zona considerada (presença de campos, florestas, cursos de água, etc) e a presença de pequenas obstruções (geralmente, pequenas construções não são consideradas individualmente, mas apenas em termos da rugosidade do solo aumentada). Neste estudo, foi utilizado um comprimento de rugosidade z_0 = 0,001 m, típico de um gramado.

Previsões dos dois modelos foram semelhantes, no entanto, os resultados de ensaios específicos diferem substancialmente e as distâncias a favor do vento calculadas pela ferramenta de CFD são, para cada ensaio, pelo menos, metade dos apresentados pelo modelo gaussiano.

Para este ensaio, e por outros similares (Mazzoldi *et al.*, 2008), o modelo de Gauss previu com precisão a concentração máxima observável durante um período de tempo especificado. No entanto, a previsão de risco a uma pessoa exposta foi superestimado, pois indicou a concentração máxima durante todo o período de tempo, o que não ocorre na realidade. O modelo de CFD subestimou a concentração máxima, porém foi mais realista durante todo o período de exposição.

Mazzoldi *et al.*, 2008 verificaram que as previsões de PANACHE® subestimaram os valores de concentração em cerca de 33%. Consequentemente, o modelo sobrepreviu a diluição do gás nos volumes de controle perto da origem. Os resultados mostraram uma superestimativa das concentrações nos experimentos com atmosfera instável (classes A e B), com erros de até uma ordem de grandeza. Isto pode ser devido à dissipação da turbulência superestimada pelo modelo k-ε e consequente superpredição de concentração de gás longe da fonte. Para os ensaios com condições atmosféricas muito estáveis (classe F), por outro lado, o modelo k-ε subestimou a concentração de SO_2. Por esta razão, os autores utilizaram o modelo k-ε (modificado) nos ensaios com uma atmosfera muito estável, que mostrou um desempenho muito melhor para as condições de classe F.

Já as simulações com ALOHA® também deram bons resultados, embora subestimando as concentrações a curtas distâncias e superdimensionando a

distâncias longas para condições atmosféricas instáveis (classes A e B), e comportamento reverso de estimativas para condições estáveis (classes E e F). Estas limitações são características de modelos de dispersão gaussianos que calculam o tamanho da pluma e limites de concentração bidimensionais usando equações algébricas (Dharmavaram *et al.*, 2005). Para condições de estabilidade neutra, os resultados variaram com a velocidade do vento, o modelo ligeiramente superestimou para valores elevados de velocidade ambiente ($v > 6ms^{-1}$) e subpreviu para velocidades baixas ($v < 3ms^{-1}$).

Mazzoldi *et al* .(2011) utilizaram um modelo CFD para simular um lançamento de alta velocidade de CO2 com o objetivo de avaliar o efeito da dispersão inicial do gás na direção do vento atingindo concentrações tóxicas do poluente, durante um vazamento de transporte de CCS.

Por ser o dióxido de carbono mais denso que o ar, isto influi no formato e tamanho da nuvem que tende a permanecer próxima à superfície e preencher depressões topográficas. O tempo que este gás leva para se dispersar a concentrações seguras também será dependente das condições atmosféricas (estabilidade, velocidade e direção do vento).

Os resultados desta investigação mostraram uma diminuição do risco envolvido no transporte de CO_2 em até uma ordem de magnitude, ao modelar os lançamentos com uma ferramenta de CFD em comparação com a gaussiana.

Hanna *et al.* (2009) utilizaram o modelo de fluidodinâmica computacional FLACS® para simular o transporte e dispersão de uma nuvem densa de cloro, que é geralmente armazenado e transportado como um gás liquefeito pressurizado.

Apesar do modelo de CFD mostrar com detalhes o escoamento e a dispersão muito melhores se comparados aos demais modelos simples de gás denso que são comumente utilizados, diversas semelhanças foram encontradas nos resultados por eles obtidos.

Alguns modelos de CFD estão sendo utilizados para domínios específicos de construção urbanos e estão dentro de domínios de mesoescala meteorológicos, a fim de se obterem melhores condições de contorno para o modelo de CFD (por exemplo, Coirier *et al.*, 2005). No FLACS® as equações de conservação são resolvidos em uma grade cartesiana usando um método de volumes finitos e equações de turbulência do tipo k-ε.

O uso de modelos de CFD para calcular a dispersão é amplamente empregado nas avaliações quantitativas de risco de explosão (Hansen *et al.*, 1999, 2001), e é recomendado pelos padrões da indústria em certos países (NORSOK, 2001).

Hanna *et al.* (2004) e Dharmavaram *et al.* (2005) fizeram algumas modificações no modelo de k-ε padrão para a turbulência da camada limite atmosférica e

aplicações na dispersão. O modelo FLACS® utilizado considerou a especificação da velocidade do vento a uma certa altura de referência e a especificação da classe de estabilidade (A a F) de Pasquill e comprimento de rugosidade de superfície, z_0. Vários outros modelos de CFD têm adotado esse procedimento para considerar a propagação lateral da pluma, maior do que a estimada pela energia cinética turbulenta sozinha.

Verifica-se também que a maioria dos modelos de qualidade do ar supõe que o material poluente não afeta o campo de escoamento.

Hanna *et al.*, 2009 simularam uma liberação hipotética perto do centro urbano com as piores condições climáticas - atmosfera muito estável (classe F) e baixa velocidade do vento (3 m/s). O comprimento da rugosidade superficial da área urbana, de modo geral, foi estimado em 50 cm. Para modelos como SCIPUFF®, que podem explicar as variações de comprimento de rugosidade, estimou-se para a área aberta perto da fonte o valor de 10 cm.

Foram considerados dois cenários de simulação, um com efeito de gás denso de maneira que a densidade da nuvem afeta a velocidade e direção do escoamento e a movimentação vertical; e outro com comportamento de gás leve. Dessa forma, a curva de contorno de determinada concentração pode estender-se mais a favor do vento quando o terreno é plano e há menor mistura mecânica devido às edificações. Assume-se que a velocidade do vento é insignificante e que não influencia o transporte nem a dispersão da nuvem. É importante ressaltar que os efeitos de obstáculos, a exemplo das construções em áreas urbanas, podem provocar diferentes comportamentos na dispersão das nuvens; aumentando a dispersão quando afastados da fonte ou confinando a nuvem e elevando a concentração dos gases.

Sklavounos e Rigas (2005) descreveram uma comparação entre as simulações por modelo CFD (CFX®) e modelos simples como o SLAB®, ALOHA® e DEGADIS® e concluíram que todos os modelos apresentaram resultados aceitáveis, mas que o modelo CFD demonstrou uma precisão consideravelmente melhor.

Os códigos de CFD comerciais geralmente não fornecem modelo específico de turbulência para simular os efeitos de estratificação da atmosfera, conhecidos pela abordagem de classe de estabilidade.

Pontiggia *et al.* (2009) realizaram um estudo para introduzir as características atmosféricas em simulações de CFD e o validaram por comparação com os dados experimentais disponíveis. Os resultados de CFD foram validados com êxito contra dados experimentais de campo (Sklavounos e Rigas, 2006), ensaios em laboratório (McBride *et al.*, 2001) e também em análises de geometrias complexas, como *canyons* urbanos (Steven *et al.*, 2006).

Pontiggia *et al.* (2011) usaram a ferramenta CFD (pacote Fluent 6.3) para prever as conseqüências da ruptura de vagões de GLP e foi encontrada uma grande influência dos obstáculos sobre a dispersão de GLP. Os modelos de CFD mostram-se potencialmente melhores em prever a influência de edifícios e os dados previstos estão de acordo com os observados na região danificada. A seguir são mecionadas algumas análises, citações e considerações interessantes deste artigo.

Enquanto os materiais tóxicos podem se dispersar a maiores distâncias a favor do vento antes da nuvem se diluir abaixo do limite de toxicidade aguda (CCPS, 2000 e Uijt de Haag e Ale, 1999), áreas de risco relacionados com a dispersão de nuvens inflamáveis são relativamente menores (aproximadamente, até o limite inferior de inflamabilidade, que é geralmente muito maior do que a concentração limiar de toxicidade aguda).

Diversos trabalhos vêm sendo publicados sobre a dispersão de materiais tóxicos em áreas industriais próximas a áreas com alta densidade populacional, como Hanna *et al.* (2008), Hanna *et al.* (2009) e Pontiggia *et al.* (2010) e menor atenção tem sido dada à dispersão de materiais inflamáveis que, no entanto, podem levar a eventos muito destrutivos, como explosões ou *flash-fires*, chegando a maiores proporções por meio de efeito dominó, portanto devem ser estudados com o mesmo cuidado.

Como os modelos usuais desconsideram os efeitos de obstáculos, os modelos de CFD vêm se destacando na estimativa da dispersão atmosférica de materiais perigosos em domínios geometricamente complexos mesmo que suas validações experimentais sejam escassas por causa da falta de condições experimentais em áreas urbanas.

Pontiggia *et al.* (2010) também estudaram liberações de amônia com foco em análise de risco em áreas que contém geometrias complexas. Como as consequências da dispersão de gás tóxico dependem principalmente da dose absorvida, aplicou-se uma metodologia dedicada ao código de CFD para esta avaliação. Como os perfis de concentração de vazamentos instáveis variam com o tempo, eles não podem ser usados diretamente para a análise de risco, ou seja, para avaliação do risco individual e social. Regressões do tipo Probit são comumente usadas neste cenário para calcular a probabilidade de morte por exposição à determinada substância tóxica. Este artifício foi implantado em um modelo de CFD, previamente validado, para estimar regiões de probabilidade de morte. A estratificação atmosférica também foi levada em conta. Os resultados foram comparados aos de modelos integrais e constatou-se que estes últimos podem superestimar como subprever a magnitude das consequências dos vazamentos.

Isnard (2004) estudou em sua tese a dispersão de poluentes atmosféricos, metano como gás traçador, sobre topografias complexas tridimensionais, realizando

simulações computacionais com o código de CFD comercial Fluent® (Versão 6.0.12) considerando estratificações atmosféricas neutra e estável sobre colinas e terreno plano. A modelagem matemática incluiu o modelo de tensões de Reynolds para a turbulência e utilizou um modelo de duas camadas, com maior refinamento da malha na região próxima à parede. Os resultados numéricos foram comparados a dados obtidos em experimentos em túnel de vento disponíveis na literatura. Também foram realizadas comparações com resultados obtidos com a utilização do modelo $k-\varepsilon$ clássico. A utilização conjunta do modelo de tensões de Reynolds e do tratamento em duas camadas produziu os melhores resultados na predição do escoamento.

A dissertação de Fleck (2008) cerne sobre a dispersão de gases inflamáveis liberados em vazamentos em plataformas *offshore* com o uso do CFX® 11.0 – *software* de CFD. O intuito deste trabalho foi otimizar a quantidade e localização dos detectores na plataforma a fim de identificar vazamentos, com eficiência e o mais breve possível. Como a área dos compressores é indicada como a de maior probabilidade de vazamentos, esta foi tomada como estudo de caso. Verificou-se que quando o vazamento ocorre num sentido contrário ao vento a nuvem formada tende a ser mais espalhada e atingir maiores alturas, porém este comportamento deve ser validado para estes cenários já que, na literatura, foram encontradas tendências contrárias. Constatou-se também que a direção de vazamento para baixo é a mais crítica, com maior extensão de pluma, pois confina o gás entre o piso e os equipamentos. Observou-se que quase não houve influência do vento, pois os jatos - que possuem elevada quantidade de movimento - não permitem que a dispersão seja rapidamente controlada pelas forças gravitacionais e pela turbulência atmosférica.

3.4.3 Inversão térmica

A mistura vertical atmosférica é facilitada pelo movimento ascendente de ar quente próximo da superfície para o ar frio imediatamente acima. Nos casos em que este perfil de temperatura é invertido e o ar quente encontra-se acima de ar frio na superfície, o movimento vertical é restrito, definindo uma inversão térmica, caracterizada por condições atmosféricas estáveis, e resulta na acumulação de poluição do ar. Velocidades horizontais de vento também são reduzidas, limitando o transporte de poluentes na direção do vento (Wallace *et al.*, 2010).

Recentes estudos de Wallace e Kanaroglou (2009a, 2009b) indicam que as inversões diurnas ocorrem com maior freqüência na primavera (37%) e no inverno (36%) e com menor freqüência no outono (17%) e no verão (10%), sendo as noturnas mais freqüentes que as diurnas. Os autores destacaram um aumento distinto nas

concentrações de poluição durante inversões de temperatura em Hamilton, Canadá.

Segundo Wallace *et al.* (2010), as inversões podem se dar perto da superfície ou em alturas elevadas, e ambas podem levar a altas concentrações de poluição. A diferença média de temperatura entre os dois níveis de pressão foi de 2,8 K para inversões noturnas e 2,4 K para eventos diurnos.

Segundo Seinfeld (1986) *apud* Zhang e Ghoniem (1994), uma camada de inversão refere-se à situação em que a atmosfera está quase neutramente estratificada exceto para uma fina camada elevada através da qual a densidade muda repentinamente para um valor inferior. Durante o dia, o lado superior da camada limite convectiva atua como uma camada de inversão, cuja altura aumenta gradualmente com o tempo. Após o pôr-do-sol, a inversão ocorre próximo ao solo como resultado da perda de calor por radiação a partir da superfície da terra, conduzindo à elevação da interface entre o ar frio e quente para altitudes elevadas.

A presença e as propriedades de uma camada de inversão são críticas para a dispersão de gases quentes. Quando uma pluma ascendente é capaz de penetrar em uma camada de inversão, a estabilidade da camada impede a pluma de misturar-se com o ar abaixo dela e a concentração dos gases próximo ao solo permanece baixa. Por outro lado, se a pluma não pode penetrar na camada de inversão, a dispersão para cima é impedida, e os gases ficam presos debaixo da inversão acarretando o aumento de concentração dos mesmos.

Segundo Zhang e Ghoniem (1994), costuma-se fazer uma aproximação da inversão assumindo que a densidade do ar não varia mais com a altura em todos os lugares, exceto para uma queda de densidade na altura da camada de inversão, em que z é a coordenada vertical, ρ_s é a diferença entre a densidade do ar e a densidade do ar abaixo da camada de inversão, ρ_0. A queda de densidade ao longo da camada de inversão, $\Delta\rho_i$, é uma característica da resistência da inversão. Na maioria das vezes, a espessura da camada de inversão é pequena comparada ao tamanho da pluma. Ver Figura 25.

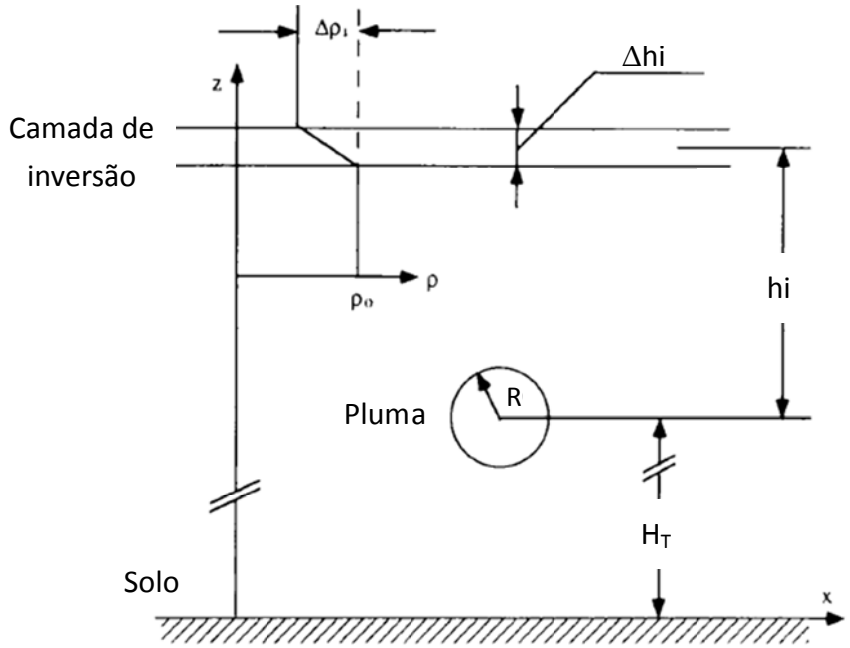


Figura 25: Esquema com os parâmetros usados na caracterização da pluma e da camada de inversão térmica (Zhang e Ghoniem, 1994).

Zhang e Ghoniem (1994) referenciam diversos modelos de penetração da pluma que foram desenvolvidos para avaliar a fração dos gases da pluma que ficou retida na altura inicial da camada de inversão.

Richards (1963) foi o primeiro a desenvolver experimentos laboratoriais para medir a penetração da pluma na camada de inversão e obteve uma fórmula empírica para a fração retida que, apesar de útil, era de difícil aplicação pois alguns termos eram desconhecidos a priori. Briggs (1975) desenvolveu um modelo baseado na queda de flutuabilidade da pluma ao atravessar uma camada de inversão de espessura nula e descobriu que a fração retida é função da altura da camada de inversão e da altura de equilíbrio da pluma.

Manins (1979) usou experimentos com túnel de vento para mostrar que em uma fina camada de inversão a fração da pluma que fica retida é aproximadamente independente da velocidade do vento e varia apenas com a altura da inversão e a razão entre a resistência da inversão e a flutuabilidade da pluma. Tanto nas observações de Richards (1963) quanto nas de Manins (1979) as dispersões das plumas tiveram comportamentos semelhantes.

Diversos modelos para camadas de espessura finita e mais espessas também foram propostos e Ero (1977) identificou que a máxima altura alcançada pela pluma é inversamente proporcional à força de resistência da inversão.

A ascensão e penetração de uma pluma através de uma camada de inversão está fortemente relacionada com o padrão de dispersão da pluma. O modelo de

pluma computacional desenvolvido por Zhang e Ghoniem (1993, 1994), que apresentou bons resultados para descrever a elevação e dispersão da pluma em atmosferas neutras e linearmente estratificadas, foi utilizado para simular a penetração da pluma na camada de inversão.

No estudo supracitado foi utilizada a aproximação de Boussinesq, que tem se mostrado precisa quando a perturbação na densidade em relação à densidade de referência é menor do que 0,1 conforme Zhang e Ghoniem (1993). Assim, o fluido pode ser considerado incompressível, simplificando os cálculos e sem a perda de processos físicos importantes para a simulação, justificado por Luti e Brzustowski (1977) e Briggs (1984) *apud* Zhang e Ghoniem (1993).

Em todos os casos as plumas apresentaram inicialmente a forma de seção circular e após foram se bifurcando em dois ou mais pedaços distintos, conforme (Partes I e II, Zhang e Ghoniem, 1993, 1994) e os experimentos de Richards (1963) e Manins (1979).

Segundo os autores existem três parâmetros adimensionais independentes que afetam a interação entre a pluma e camada de inversão: (1) a distância entre a altura inicial da pluma e a altura da camada de inversão, hi/R, (2) a queda da densidade ao longo da camada de inversão, caracterizando a sua força de resistência através de $\left|\frac{\Delta\rho_i}{\varepsilon\rho_0}\right| = \frac{\Delta\rho_i}{\rho_p}$ e (3) espessura da camada de inversão Δhi/R.

Foram apresentados os resultados computacionais da evolução da seção transversal da pluma para os seguintes casos: penetração total da pluma na camada de inversão, a penetração parcial e o aprisionamento total.

Na maioria dos casos, a maior concentração ocorre na altura de inversão, confirmando o observado em laboratório por Willis e Deardorff (1987). Verificou-se que ao longo da camada de inversão, similar ao que foi observado no caso de ascensão da pluma em uma atmosfera linearmente estratificada, foram geradas ondas de turbulência. A interação entre a pluma e a camada de inversão leva à gradual transformação da energia cinética em vorticidade na atmosfera ao redor e um fluxo turbulento é gerado.

A estrutura complexa da camada de inversão dificulta definir precisamente a penetração da pluma. Quando hi/R é grande, espera-se que a pluma perca seu potencial de penetração devido à diluição do seu empuxo antes de alcançar a camada de inversão.

Os autores estudaram a fração retida da pluma para seis diferentes alturas de inversão e, como esperado, quanto mais alta a camada de inversão mais difícil é a penetração da pluma e maior é a fração retida da pluma. O mesmo ocorre quanto maior a força da camada de inversão. Sob forte inversão, a pluma para de subir

assim que colide com a camada, já para inversão moderada a pluma se mistura com a camada e oscila para baixo conforme as ondas se propagam ao longo da camada. Para inversões fracas a pluma continua ascendendo.

Para uma camada espessa a estratificação é fraca e a pluma penetra a camada e continua ascendendo; porém para uma camada fina a pluma é impedida de subir além da altura de inversão. Nos casos de espessura moderada as plumas ficam presas dentro da inversão e ocorre uma penetração parcial.

Por fim os autores compararam seus resultados com os experimentos de Manins (1979) e Richards (1963), e constataram que seus resultados estavam de acordo com os experimentos.

Fedorovich e Thäter (2002) realizaram simulações em túnel de vento da dispersão de gás poluente na camada limite atmosférica convectiva (CLC) contida por uma camada de inversão térmica. Os experimentos foram realizados em túnel de vento termicamente estratificado com CLC cisalhante reproduzida, na Universidade de Karlsruhe (UniKa), Alemanha, e seus resultados foram comparados com os dados de outros estudos laboratoriais e numéricos de fluxo turbulento e difusão na CLC atmosférica.

As propriedades de difusão e de mistura de turbulência nos casos de CLC estudados têm se revelado como essencialmente dependentes da fase da evolução da CLC. O cisalhamento imposto através da inversão foi identificado como inibidor do aumento da extensão vertical da camada limite atmosférica. Forças cisalhantes do vento na superfície e através da camada de inversão são contribuições adicionais à geração de turbulência na CLC.

Eles mostraram, assim como Lamb (1982), que a linha central média da pluma liberada por uma fonte elevada na CLC desce rapidamente na direção do vento e em contrapartida, a pluma liberada próximo à superfície ascende rapidamente no interior da CLC. Estas observações, que são inconsistentes com as previsões do modelo de pluma gaussiana, manifestam o caráter específico da dispersão na CLC associada ao campo de velocidade verticalmente inclinado.

O decréscimo da concentração com a altura no túnel de vento (Unika) não foi tão abrupto como no reservatório de água de Willis e Deardorff (1978), onde a inversão era relativamente mais forte, bloqueando efetivamente o transporte vertical.

No túnel de vento, quando a fonte é elevada, a linha de máxima concentração segue aproximadamente o nível da inversão, enquanto que no caso da fonte próxima à superfície, os valores máximos de concentração são observados a favor do vento na porção média da CLC. A difusão do gás traçador em ambos os casos é bloqueada pela camada de inversão. Sorbjan (1989), indicou que o regime de difusão observada no caso da fonte de elevada é comumente referido como *fumigation* (fumegante),

como pode ser visto na Figura 26. Segundo Lisboa, 2007 esta condição é típica das primeiras horas após a saída do sol, provocando instabilidade junto ao solo (após uma noite com inversão ou grande estabilidade).

Figura 26: Condição fumegante (*fumigation*) (Lisboa, 2007)

Quando a fonte está acima da inversão apenas uma quantidade insignificante de material traçador penetra na camada de inversão ou crescente CLC. Neste caso, a dispersão da pluma é mantida por movimentos turbulentos fracos suprimidos pela estratificação estável no interior da camada de inversão e no fluxo exterior acima dela. Tal regime de difusão é geralmente chamado *fanning* (tubular) (Sorbjan, 1989), mostrado na Figura 27. Conforme Lisboa, 2007 as condições predominantes para ocorrência deste fenômeno são grande estabilidade atmosférica e ausência de efeitos mecânicos, e são típicos de fim de tarde, noite e amanhecer.

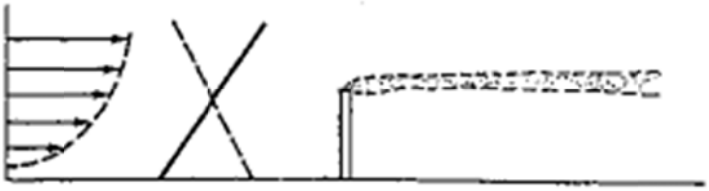


Figura 27: Condição tubular (*fanning*) (Lisboa, 2007)

Os autores compararam os padrões de concentração com uma camada limite neutramente estratificada (CLN) e verificaram que os níveis de alta concentração na superfície na camada convectiva estavam mais próximos da fonte, enquanto que no caso da camada neutra estavam mais distantes. A principal razão para isso é a assimetria das distribuições de densidade da velocidade vertical na CLC. Movimentos descendentes, por mais fracos que sejam, comparados com correntes térmicas ascendentes mais estreitas e rápidas, são estatisticamente dominantes na CLC. Devido a isto, a maior parte do material liberado no centro de uma camada convectiva primeiramente desce até uma certa distância e, portanto, produz elevados níveis de concentração próximos da superfície. A dispersão da pluma na camada neutra é consideravelmente mais estreita do que na convectiva, resultante do movimento turbulento lateral na CLC devido ao empuxo.

4 MATERIAIS E MÉTODOS

Conforme o exposto no item 3.4 o modelo de fluidodinâmica computacional apresenta diversas vantangens frente aos demais modelos de dispersão gasosa, além de ter seu desempenho atestado por diversos estudos prévios que comprovam a validade dos seus resultados. Dessa forma, este trabalho foi realizado utilizando um modelo de CFD de acordo com os materiais e métodos descritos abaixo.

4.1 *Software* e *Hardware*

As simulações foram realizadas utilizando o *software* de fluidodinâmica computacional CFX e Workbench da ANSYS na versão 13.1.

O equipamento utilizado foi uma estação gráfica da empresa SUPERMICRO, constituída de 6 processadores Intel Xeon quad-core com 2.80 GHz, 12 GB de memória RAM e 1 TB de memória física.

4.2 Estudo de caso

O objetivo deste trabalho é simular em 2 dimensões a dispersão de gases emitidos por tochas de refinarias de petróleo e analisar o alcance e concentrações atingidas por esses gases. Para isto, adotou-se como domínio de estudo uma seção transversal contendo um *flare,* uma refinaria e seguida de uma planície (representando uma área ao redor da refinaria).

4.3 Características da fonte de emissão

Neste trabalho foi avaliada a emissão de gases de combustão em tocha provenientes da carga normal de *vents* de várias unidades de processo de uma refinaria, o sistema de alívio de emergência. Analisou-se um *flare* de hidrocarbonetos dimensionado para a coleta de todas as descargas de alta pressão de diversas unidades de uma refinaria típica, como a de Destilação Atmosférica e a Vácuo, Coqueamento Retardado, Hidrotratamento de Instáveis, de Destilados médios, Hidrocraqueamento, Geração de hidrogênio, Estocagem em esferas, Geração e distribuição de vapor, Tancagem, entre outras.

Nas Tabelas 8, 9 e 10 são apresentados os parâmetros adotados para

caracterizar um gás de refinaria e um *flare* típicos:

Tabela 8: Parâmetros do gás a ser queimado

PARÂMETRO	VALOR
Vazão mássica de projeto (kg/h)	1400000 (389 kg/s)
Temperatura (ºC)	300
Pressão (bar)	1,4

Tabela 9: Composição e propriedades do gás a ser queimado

COMPOSTO	(%MOLAR)
Metano	45
Etano	9
Eteno	1,45
Propano	10
Propeno	4
Butanos	1,5
Butenos	1,5
Butadieno	0,05
Pentanos	0,1
Dimetilbutano	2
Hexano	2
Heptano	3,2
Nitrogênio	0,5
Dióxido de carbono	0,5
Água	3,5
Amônia	0,2
Sulfeto de hidrogênio	2
Hidrogênio	12,5
Monóxido de carbono	1
Massa molar (kg/kmol)	27,13
Massa específica (kg/m^3)	0,7976
Calor específico (J/kg ºC)	2,825 x 10^3
Viscosidade (cP)	1,997 x 10^{-2}
Condutividade (W/mK)	7,433 x10^{-2}

Tabela 10: Características do *flare*

Altura (m)	150
Diâmetro (m)	2

A vazão do gás adotada acima foi calculada a partir de um diâmetro de *flare* de 2m (típico para uma refinaria com capacidade de processamento de 150000 bpd), segundo o critério apresentado na ANSI/API STD 521 (2008) de que a velocidade dos gases no interior do *flare* deve corresponder a um número de Mach (Ma) igual a 0,5. Segundo esta norma, recomenda-se que a velocidade correspondente a Ma = 0,5 seja permitida por curtos períodos ou por fluxo pouco frequente; e que em condições normais (mais frequentes) de operação, a velocidade seja mantida ao equivalente a Ma = 0,2.

Para o caso de velocidade equivalente a Ma = 0,2 a vazão passa a ser aproximadamente 40% da vazão de projeto, ou seja, 560000 kg/h (ou 156 kg/s).

Conforme citado nos capítulos 2 e 3, a consideração de queima total dos compostos é adequada, já que Baukal e Schwartz (2001) indicam uma eficiência de combustão de queimadores de *flare* superior a 98% e costuma-se assumir que 100% do enxofre disponível é convertido em SO_2. Há também a recomendação do IPCC (1996) de que 99,5% do carbono presente nas correntes de gás são convertidos em CO_2 e a conversão de 100% do enxofre total a dióxido de enxofre, segundo Villasenor *et al*. (2003).

Assim, para a queima total dos compostos na tocha obtém-se a composição dos gases emitidos após a combustão (pluma) mostrada na Tabela 11:

Tabela 11: Composição e propriedades do gás de combustão

COMPOSTO	(%MOLAR)
N_2	0,12
CO_2	39,25
H_2O	60,11
SO_2	0,47
NO_2	0,05
Massa molar (kg/kmol)	28,46
Temperatura (ºC)	700
Pressão (atm)	1,0
Massa específica (kg/m^3)	0,3564
Calor específico (J/kg ºC)	1,615 x 10^3
Viscosidade (cP)	3,564 x 10^{-2}
Condutividade (W/mK)	7,560 x10^{-2}

4.4 Definição das condições atmosféricas

O ar ambiente considerado tem composição e condições atmosféricas mostradas na Tabela 12:

Tabela 12: Dados do Ar Ambiente

AR AMBIENTE (%MOLAR)	
N_2	0,79
O_2	0,21
PROPRIEDADES	
Massa molar (kg/kmol)	28,85
Temperatura (ºC)	25
Pressão (atm)	1,0
Velocidade de entrada (m/s)	5
Massa específica (kg/m^3)	1,18
Calor específico (J/kg ºC)	1,012 x 10^3
Viscosidade (cP)	1,883 x 10^{-2}
Condutividade (W/mK)	2,592 x10^{-2}

Conforme apresentado na Tabela 7 por Turner (1970) *apud* Soares (2006); as categorias de estabilidade atmosférica de Pasquill indicam que as classes A (extremamente instável) e F (estável) somente ocorrem sob vento fraco, abaixo de 3 m/s. As classes B (moderadamente instável) e E (levemente estável) não ocorrem sob vento maior que 5m/s. Já as classes C (levemente instável) e D (neutra) caracterizam-se por ventos acima de 2m/s e 3m/s, respectivamente. Verifica-se então que a velocidade limite entre as classes é 3m/s.

Segundo o estudo de Soares (2006) o vento de intensidade forte oferece um pouco mais de risco, quando comparado com o vento fraco ou moderado, porque a massa de gás liberada avançará mais rapidamente, abrangendo um maior perímetro e gerando uma situação de perigo em tempo menor, embora a dispersão atmosférica, por difusão, ocorra com menor intensidade.

Com o auxílio da Tabela 13 é possível calcular a velocidade do vento (v) em diferentes altitudes, pois a mesma apresenta parâmetros do perfil vertical de velocidade do vento em ambiente rural de acordo com as Classes de Estabilidade de Pasquill. A altura de referência adotada é z_0 = 10m e as velocidades dos ventos consideradas para cada classe nesta altura (v_0) são apresentadas na Tabela 13.

Tabela 13: Parâmetros do Perfil Vertical de Velocidade do vento (EPA, 1995 *apud* Soares, 2006).

Classe de estabilidade	**Vento (v_0)**
A / B	3 m/s
C / D	5 e 10 m/s
E	3 e 5 m/s
F	3 m/s

Categoria Pasquill	**Perfil de velocidade do vento**	**Expoente *w***
A	$v = v_0 \left(\frac{z}{z_0}\right)^w$	0,07
B		0,07
C		0,10
D		0,15
E		0,35
F		0,55

A Figura 28 apresenta as curvas com o perfil de vento para cada classe de estabilidade atmosférica conforme equação e expoentes acima descritos, para v_0 = 3m/s:

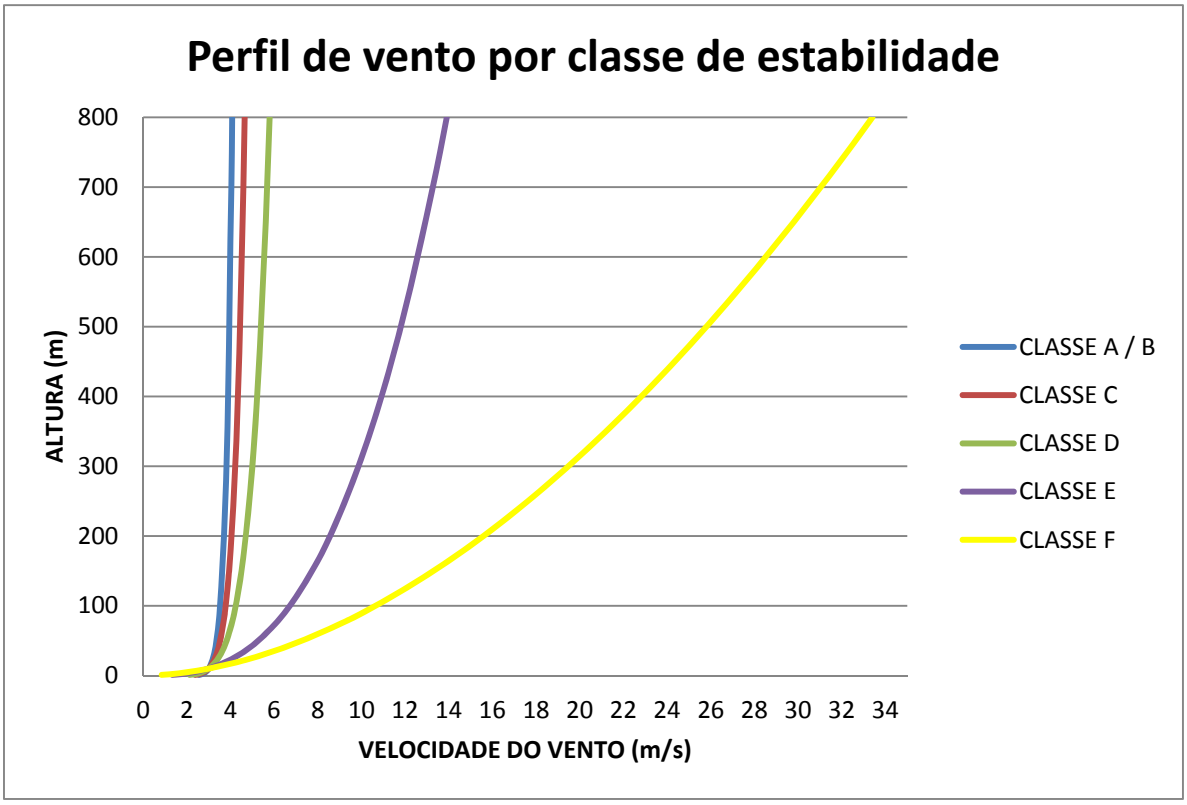


Figura 28: Perfil de velocidade de vento por classe de estabilidade atmosférica

Verifica-se que para as classes de estabilidade D, E e F (atmosfera neutra a estável), cujos expoentes são maiores, há maior variação da velocidade com a altura.

Vale ressaltar que o gradiente de temperatura da atmosfera terrestre varia com a altura conforme citado no item 3.2. O gradiente térmico adiabático da atmosfera terrestre medido nos trópicos é aproximadamente 6,5 K/km (Furtado, 2012).

Considerando que o efeito dessa diferença de temperatura ao longo da camada da atmosfera seria pouco impactante no comportamento da dispersão, foi estabelecida uma temperatura média de 25ºC para todo o domínio.

Portanto, foram utilizadas nas simulações as condições atmosféricas apresentadas na Tabela 14:

Tabela 14: Condições do ambiente adotadas nas simulações

Condições do ambiente	
Temperatura, ºC	25
Velocidade do vento, m/s	Conforme Tabela 13

4.5 Coeficientes de difusividade

Para a análise da dispersão são necessárias as difusividades dos componentes da mistura gasosa - que será emitida após a combustão – com relação ao ar. As difusividades foram calculadas pela equação de Fuller *et al.* (1966) *apud* Wesselingh e Krishna (1990) e estão apresentadas abaixo:

$$K_{AB} = \frac{1{,}0 * 10^{-9} T^{1{,}75}}{P\left[(\sum V)_A^{1/3} + (\sum V)_B^{1/3}\right]^2}\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)^{1/2} \tag{4.1}$$

onde: K_{AB} = difusividade (m^2/s)

T = temperatura absoluta (K)

P = pressão (atm)

M = massa molar (kg/kmol)

$\sum V$ = volume de difusão = soma dos volumes atômicos de todos os elementos de cada molécula. Obtido pelas Tabelas 15 e 16.

Tabela 15: Incrementos de volumes de difusão atômico ou estrutural (Wesselingh e Krishna, 1990)

Incrementos de volumes de difusão atômico ou estrutural, V x 10^{-3} (m^3/katom)	
C	16,5
H	1,98
O	5,48
N	5,69
S	17,0

Tabela 16: Volumes de difusão para moléculas simples (Wesselingh e Krishna, 1990)

Volumes de difusão para moléculas simples, $\sum V$ x 10^{-3} (m^3/kmol)	
CO_2	26,9
H_2O	12,7
ar	20,1
SO_2	41,1
N_2	17,9
CO	18,9
NH_3	14,9
H_2	7,07

A Tabela 17 apresenta as difusividades de cada componente da mistura (emitida após a queima) calculadas com o ar à temperatura de 25ºC e pressão de 1 atm.

Tabela 17: Difusividade dos componentes do gás de queima no ar ambiente

Componente	**Difusividade do componente no ar (m^2/s)**
CO_2	$1,569 \times 10^{-5}$
H_2O	$2,517 \times 10^{-5}$
NO_2	$1,828 \times 10^{-5}$
SO_2	$1,260 \times 10^{-5}$
N_2	$1,994 \times 10^{-5}$

Para o caso de falha da chama, calculam-se também as difusividades de cada componente da mistura (a ser queimada) com o ar à temperatura de 25ºC e pressão de 1 atm. A Tabela 18 apresenta essas difusividades.

Tabela 18: Difusividade dos gases a serem queimados no ar ambiente

Componente	**Difusividade do componente no ar (m^2/s)**
Metano	$2,109 \times 10^{-5}$
Etano	$1,417 \times 10^{-5}$
Eteno	$1,492 \times 10^{-5}$
Propano	$1,125 \times 10^{-5}$
Propeno	$1,165 \times 10^{-5}$
Butanos	$9,585 \times 10^{-5}$
Butenos	$9,831 \times 10^{-5}$
Butadieno	$1,010 \times 10^{-5}$
Pentanos	$8,478 \times 10^{-5}$
Dimetilbutano	$7,677 \times 10^{-5}$
Hexano	$7,677 \times 10^{-5}$
Heptano	$7,065 \times 10^{-5}$
Nitrogênio	$1,994 \times 10^{-5}$
Dióxido de carbono	$1,569 \times 10^{-5}$
Água	$2,517 \times 10^{-5}$
Amônia	$2,437 \times 10^{-5}$
Sulfeto de hidrogênio	$1,805 \times 10^{-5}$
Hidrogênio	$7,244 \times 10^{-5}$
Monóxido de carbono	$1,959 \times 10^{-5}$

4.6 Parâmetros e Condições de contorno da simulação

Os parâmetros e condições de contorno utilizados nas simulações estão apresentados nas Tabelas 19 e 20.

Tabela 19: Parâmetros das simulações

Parâmetro	Valor
Pressão de Referência	1 atm
Tipo de simulação	Estacionária
Regime de escoamento	Subsônico
Tipo de Escoamento	Incompressível*
Modelo de turbulência: Domínio	$k - \varepsilon$
Modelo de turbulência: Entrada de gás	*Medium* (*Intensity* = 5%)
Modelo de transferência de calor	*Thermal Energy*
Escala de tempo	*if(Accumulated Time Step < 10,1,500)*
Critério de convergência	*RMS* (Raiz do desvio quadrático médio)
Resíduo máximo permitido	$1x10^{-6}$
Número máximo de iterações	1000
Condição inicial	Perfil vento (conforme equação da Tabela 13) com 100% Ar a 25ºC

* Da mesma maneira que Zhang e Ghoniem,1994, será utilizada neste estudo a aproximação de Boussinesq e o fluido será considerado incompressível.

Tabela 20: Condições de contorno das simulações

Condições de contorno	Valor
Entrada do vento (*Inlet*)	Perfil vento (conforme equação da Tabela 13)
Entrada do gás – saída do *flare* (*Inlet*)	Vazão normal = 156 kg/s
	Vazão de contingência = 389 kg/s
Saídas do vento (*Opening*)	Pressão relativa = 0 atm
Equipamentos, *flare* e piso (*Wall*)	*No slip*
Camada de inversão (*Wall*)	*Free slip*

4.7 Geometria e Malha

A fim de minimizar o esforço computacional e reduzir o número de nós da malha gerada no cenário global usado nas simulações, realizou-se um domínio em 2 dimensões de 2 km de comprimento e altura de 800 m, tendo como espessura o diâmetro do *flare* (2m). Foi considerada a seguinte geometria como volume de controle: o *flare* localizado a uma distância de 200m da refinaria (atendendo aos critérios da norma ANSI/API STD 521, 2008) e uma planície representando a área ao redor da refinaria.

Uma refinaria é composta por diversas unidades industriais que representam obstáculos ao escoamento do ar ambiente provocando turbulência. Assim, unidades de uma refinaria típica, como a de Destilação Atmosférica e a Vácuo, Coqueamento Retardado, Hidrotratamento de Instáveis, de Destilados médios, Hidrocraqueamento e Tancagem foram modeladas de forma a representar os diversos equipamentos e estruturas de tamanhos variáveis, presentes em todas as unidades de uma refinaria.

Foi analisada também a ocorrência de inversão térmica à altura de 500 m, limitando a dispersão dos gases, já que a pluma fica impedida de ultrapassar a camada de inversão.

As figuras das geometrias e os dados das malhas estão apresentados nas Tabelas 21 e 22 e Figuras 29 e 30.

Tabela 21: Dados da malha 2D com 800 metros de altura

MALHA GEOMETRIA 2D (800 M)	
Número total de nós	81380
Número total de prismas	79276
Número total de elementos	79276

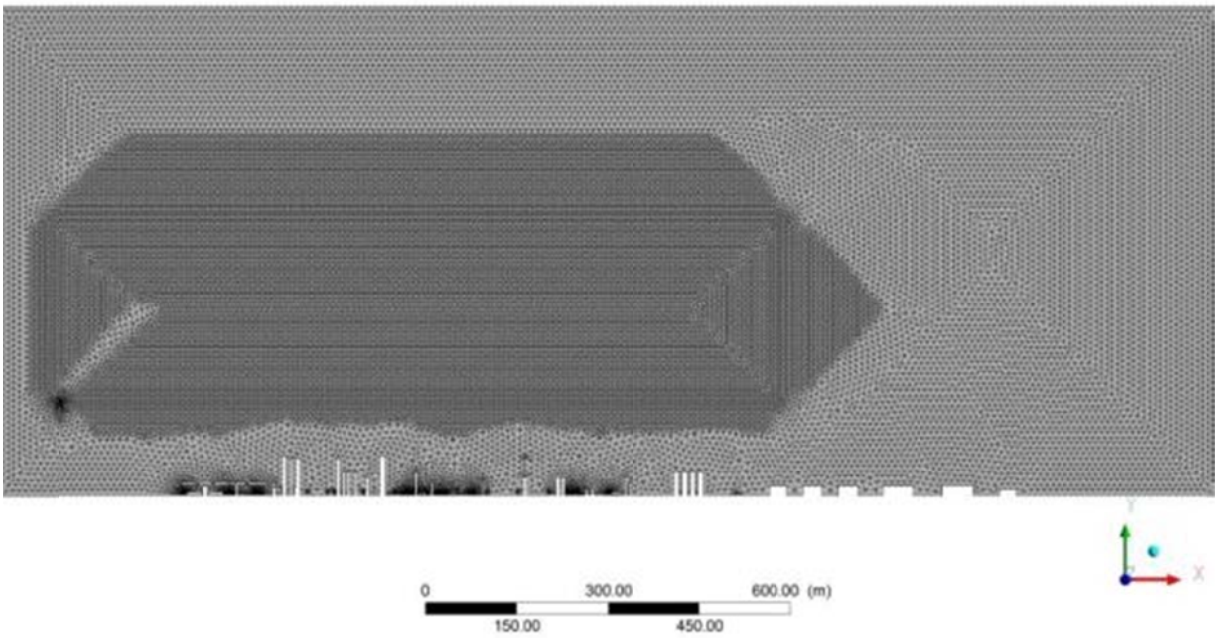


Figura 29: Malha 2D com 800m de altura

Tabela 22: Dados da malha 2D com 500 metros de altura

MALHA GEOMETRIA 2D (500 M)	
Número total de nós	51826
Número total de prismas	49788
Número total de elementos	49788

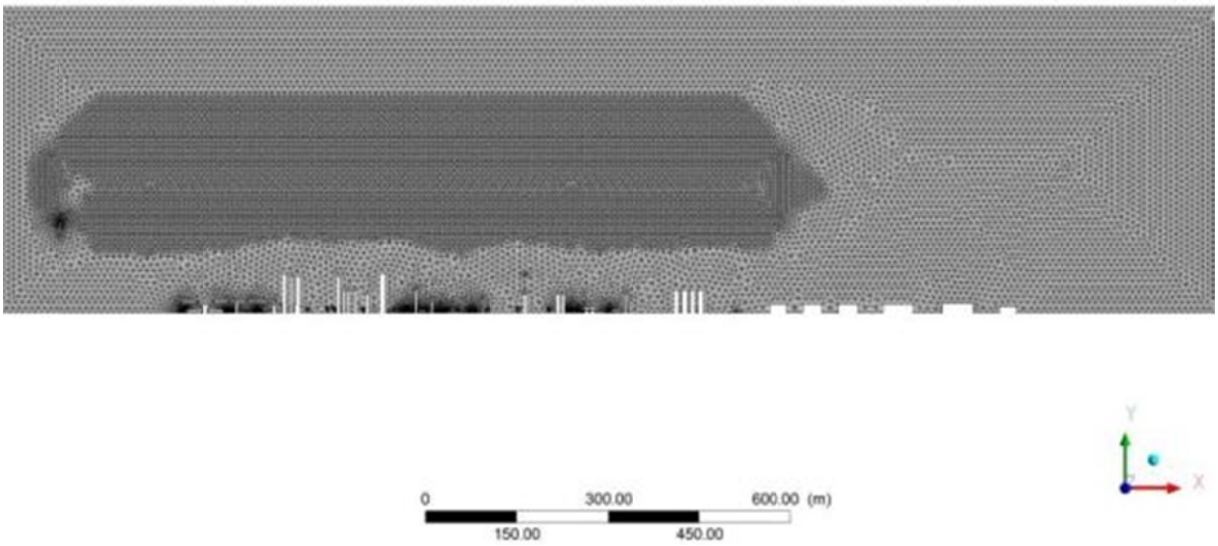


Figura 30: Malha 2D com 500m de altura

4.8 Teste de malha

Em estudos de fluidodinâmica computacional que utilizam método de cálculo por volumes finitos é importante a análise do tamanho da malha, já que quanto maior o número de nós, mais precisos são os resultados da simulação.

Cabe nesse momento realizar um teste de malha para avaliar se a malha adotada neste trabalho representa com a devida precisão os resultados, ou seja, que os mesmos sofram a menor influência possível deste parâmetro. Esta análise é feita refinando a malha computacional (aumentando o número de elementos) até que as variáveis de interesse no estudo variem minimamente com o número de elementos da malha.

As condições de contorno dessas simulações foram: Classe de estabilidade atmosférica levemente instável (Classe C), velocidade de vento a 10 metros de altura de 10 m/s, vazão de gás de 389 kg/s e condição normal de operação.

Dessa forma, foram analisadas 5 malhas com os números de nós e elementos apresentados na Tabela 23.

Tabela 23: Caracterização do Teste de malha

Malha	Número de nós	Número de elementos (prismas)	Figura
1	16522	14837	31
2	18022	16298	32
3	19814	18054	33
4	49672	47570	34
5	81380	79276	35

As Figuras 31 a 35 mostram as diferentes malhas estudadas.

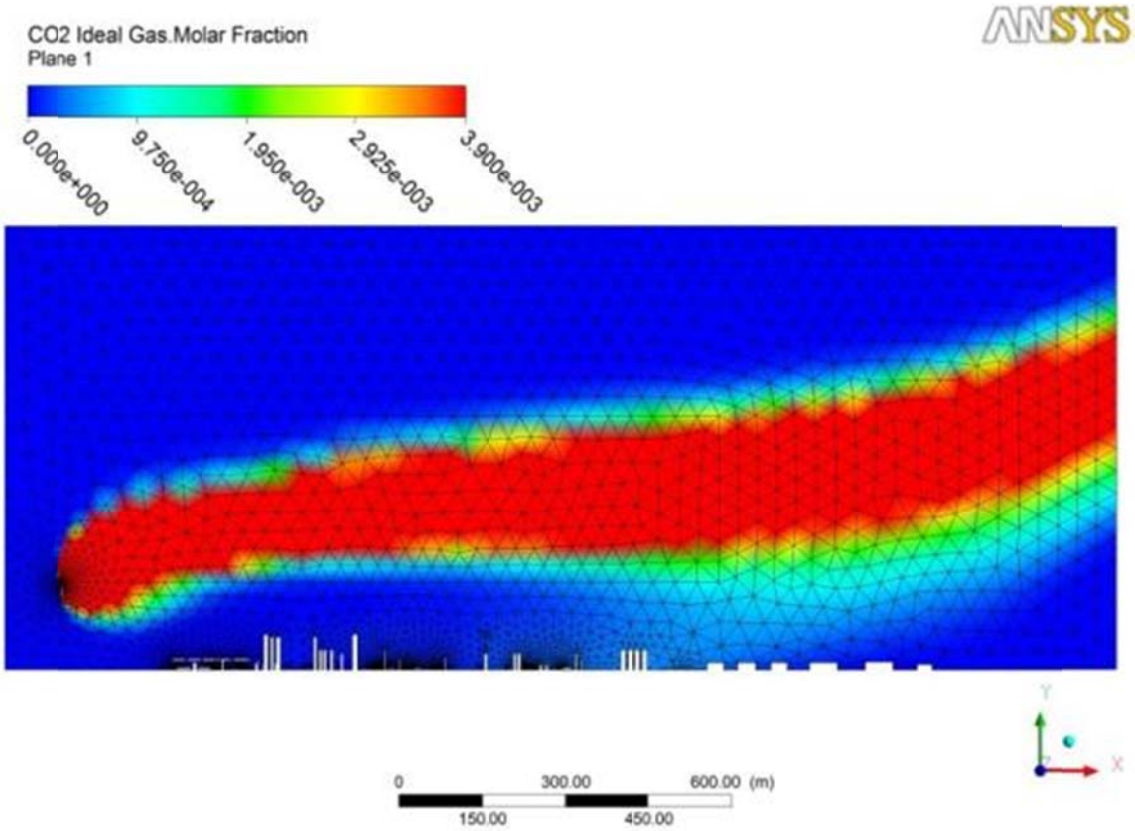


Figura 31: Perfil de pluma e distribuição dos elementos da Malha 1.

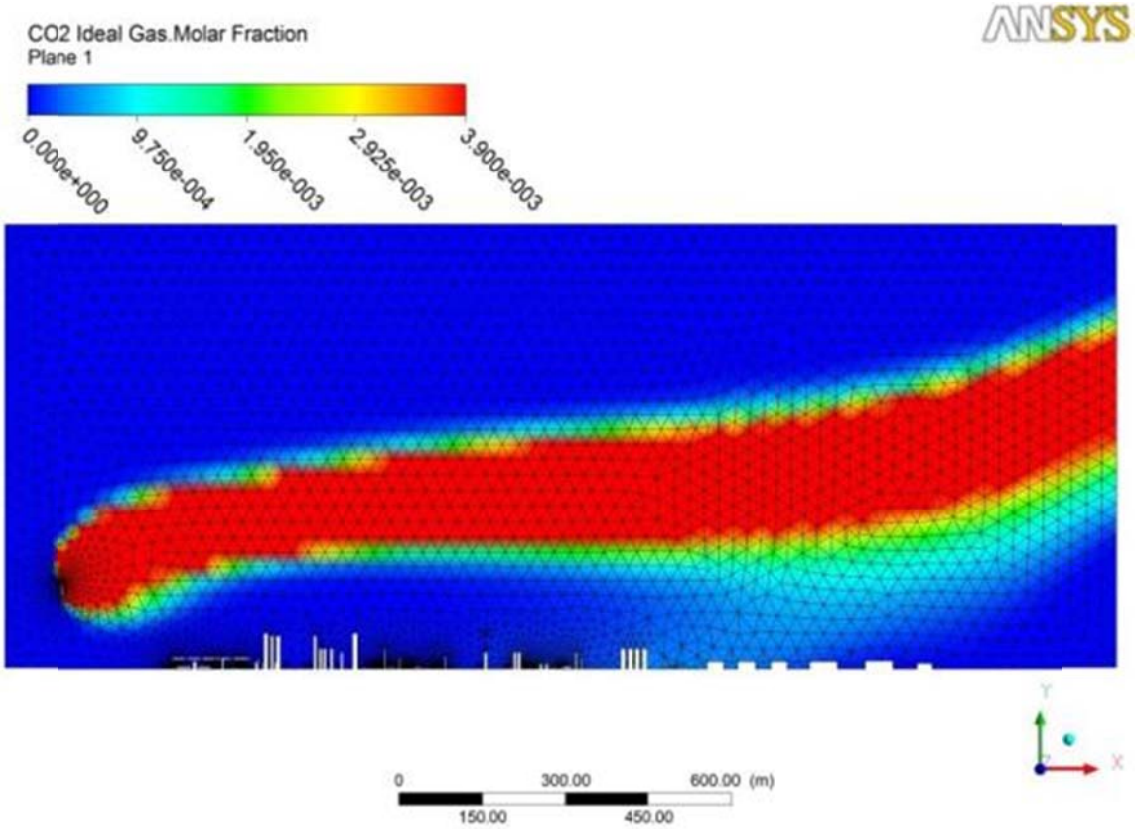


Figura 32: Perfil de pluma e distribuição dos elementos da Malha 2.

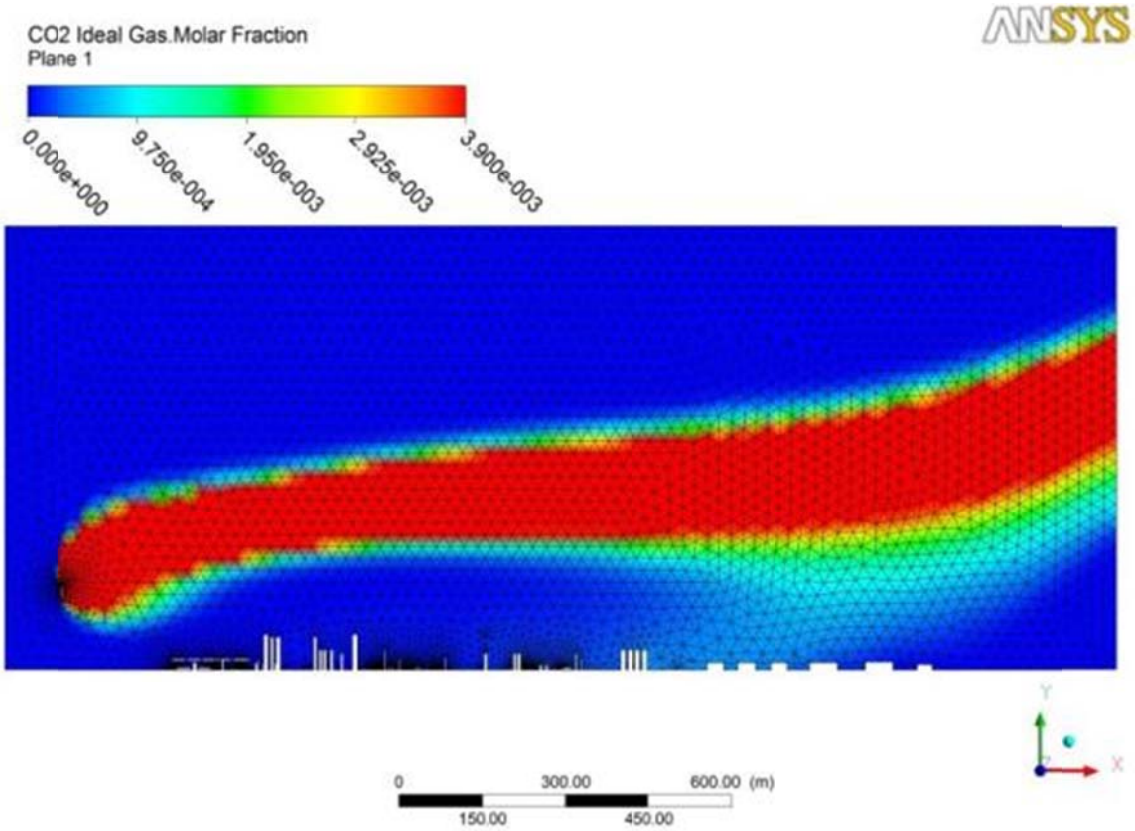


Figura 33: Perfil de pluma e distribuição dos elementos da Malha 3.

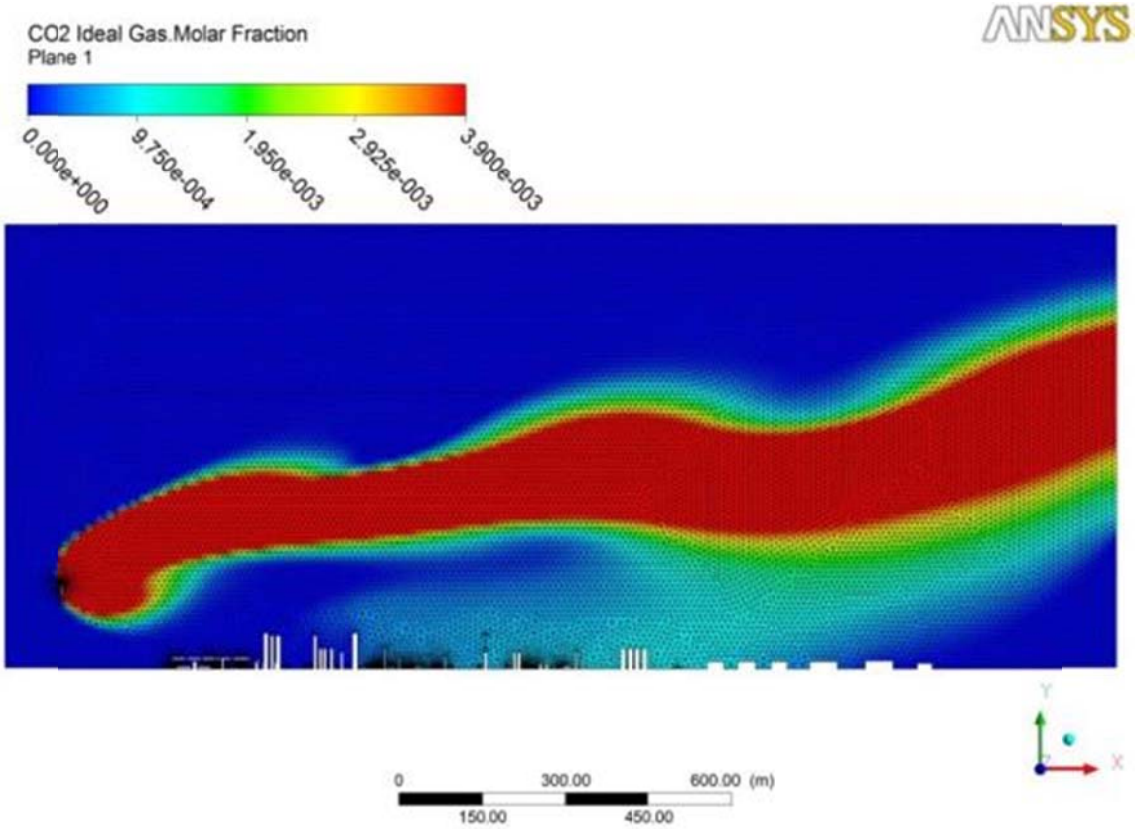


Figura 34: Perfil de pluma e distribuição dos elementos da Malha 4.

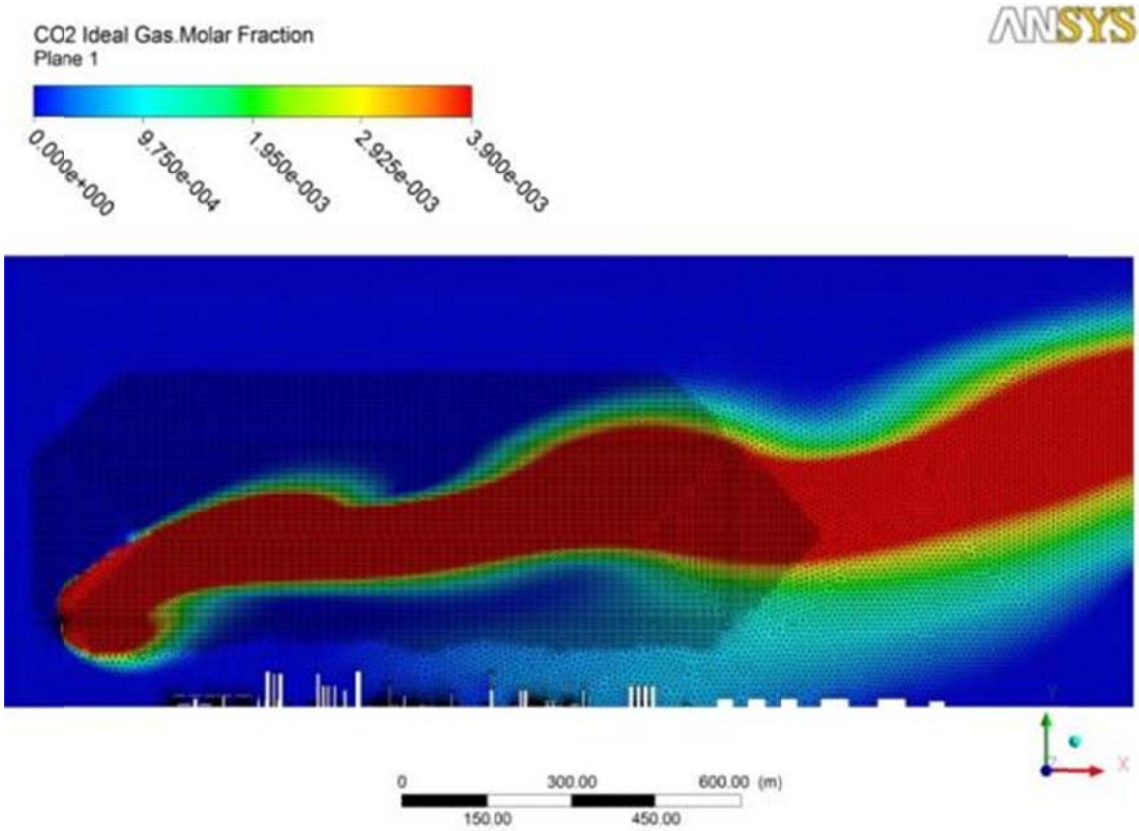


Figura 35: Perfil de pluma e distribuição dos elementos da Malha 5.

Percebe-se que com a malha mais refinada, os contornos (limites) da pluma e os efeitos difusivos são melhor identificados. Observa-se na Figura 36 o contorno da pluma nas cinco malhas e pode-se perceber que as malhas 4 e 5 representam melhor os efeitos da turbulência nos limites da pluma.

Verifica-se que os resultados para as malhas 4 e 5 estão muito próximos mesmo considerando que a turbulência da atmosfera instável (condição avaliada no teste) pode provocar oscilações nos resultados. Decidiu-se optar pela mais refinada para assegurar que tanto os efeitos de turbulência como outros (não visualizados nesta primeira análise) fossem confiavelmente representados.

Vale ressaltar que como foi considerada uma geometria em 2 dimensões, cujo tempo de simulação e esforço computacional não são tão limitantes para o estudo, a escolha da utilização de malha mais refinada não torna inviável a realização das simulações.

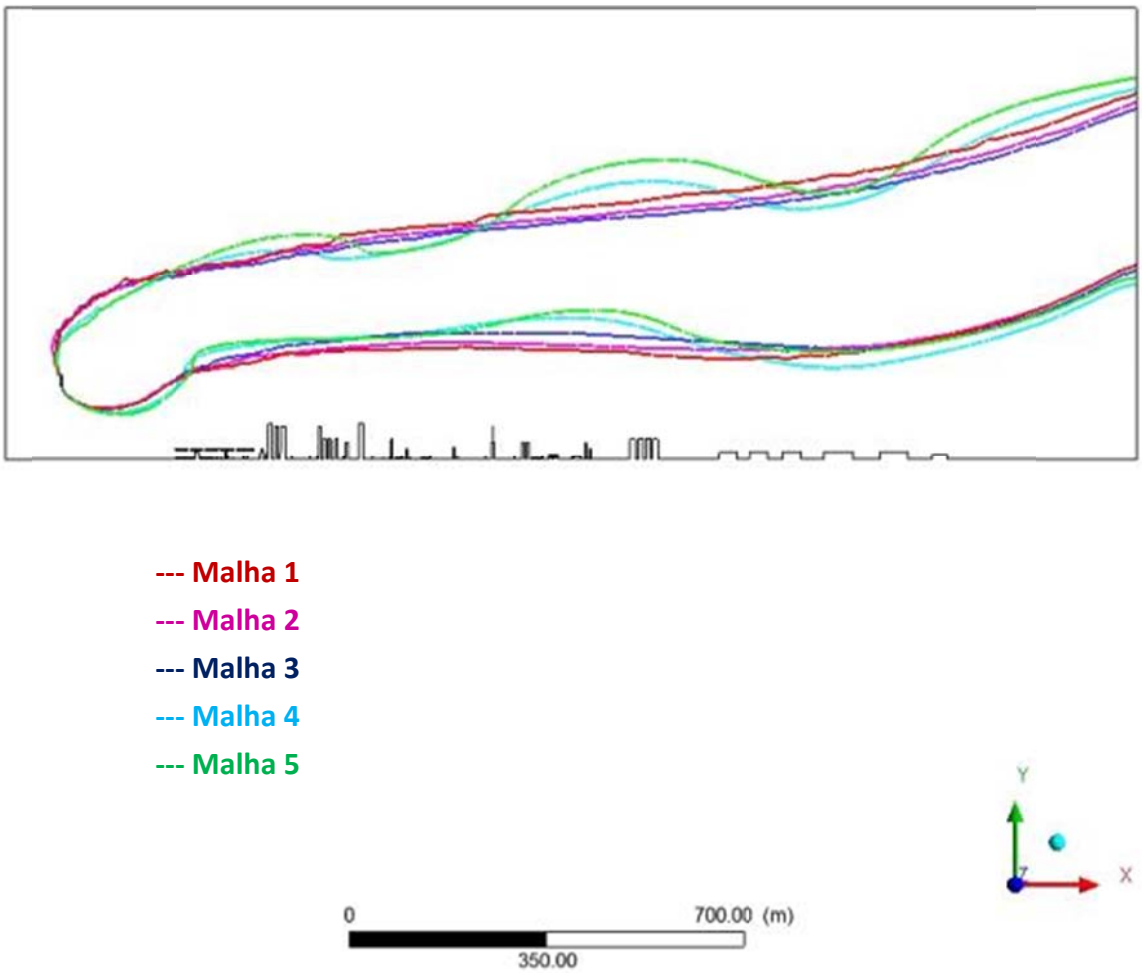


Figura 36: Contorno da pluma para as cinco malhas estudadas.

4.9 Considerações sobre Inversão térmica

Outro fenômeno frequente na atmosfera, que também é objeto deste estudo, é a inversão térmica, caracterizada por uma camada de ar cujo perfil de temperatura é invertido e o movimento vertical torna-se restrito.

Conforme Wallace *et al.* (2010), as inversões podem se dar perto da superfície ou em alturas elevadas e com velocidades horizontais de vento reduzidas, limitando o transporte de poluentes na direção do vento.

Segundo Zhang e Ghoniem (1994), os parâmetros que afetam a interação entre a pluma e camada de inversão são: a distância entre a altura inicial da pluma e a altura da camada de inversão (hi/R); a queda da densidade ao longo da camada de inversão, caracterizando a sua força de resistência através de $\frac{\Delta\rho_i}{\rho_p}$ e a espessura da camada ∆hi/R (parâmetros indicados na Figura 25). Para o caso simulado com uma fina camada de inversão (∆hi/R = 0,1), pluma bem abaixo da inversão (hi/R = 5) e forte resistência da camada ($\frac{\Delta\rho_i}{\rho_p}$=0,25), a pluma fica totalmente presa abaixo da inversão. De modo geral, quanto mais alta a camada de inversão térmica, mais difícil é a penetração da pluma e maior é a fração retida da mesma, para hi/R superiores a 4 a pluma fica totalmente retida. O mesmo ocorre quanto maior a força da camada, sendo assim, sob forte inversão, a pluma para de subir assim que colide com ela.

Posto isto, e demais detalhes característicos deste fenômeno expostos no item 3.4.3, pode-se considerar nas simulações deste trabalho a camada de inversão como uma barreira (*wall*) que impede a dispersão dos poluentes e que ocorre em condições atmosféricas neutra e estáveis.

Neste contexto, este estudo contempla simulações em condições atmosféricas neutra e estável (classes de estabilidade D, E e F), velocidades de vento fraco a moderada (3 e 5 m/s a 10 metros de altura) e altura de camada de inversão de 500m (de acordo com o recomendado por Zhang e Ghoniem (1994), para que a pluma fique totalmente retida pela camada de inversão).

4.10 Considerações sobre falha da chama

De acordo com Shore (1996) a perda da chama durante a operação de um sistema de tocha é muito comum e deve haver preocupação com a liberação dos gases sem a queima - hidrocarbonetos com maior nível de intoxicação, poluição ambiental e possibilitando a formação de nuvens inflamáveis. Existem diversas fontes de ignição, inclusive equipamentos dentro de uma refinaria de petróleo que operam em elevadas temperaturas, capazes de atingir as temperaturas de auto-ignição dos gases presentes na nuvem inflamável, causando iminente risco de explosão.

A ausência de chama (*flame-out*) costuma estar associada a parâmetros de operação e resulta de condições em que o queimador torna-se incapaz de sofrer ignição ou manter a chama.

Outros fatores que também podem provocar esta falha no sistema de tocha são as quantidades de nitrogênio, água e dióxido de carbono que absorvem calor, podendo extinguir a chama. Deve-se garantir o calor mínimo necessário para a queima.

Alguns procedimentos operacionais típicos também podem conduzir à perda da chama, como por exemplo, o controle de supressão de fumaça ou mesmo coloração mais branda da chama acarretando possivelmente o aumento excessivo da vazão de vapor até o ponto em que a chama se apague.

Dessa forma, este trabalho contempla o estudo de alguns casos em que ocorre a falha da chama e os gases são emitidos sem a devida queima.

4.11 Especificação das simulações realizadas

Tabela 24: Especificação dos casos simulados

Caso	Classe de estabilidade atmosférica	Velocidade de vento (v_0) (m/s)*	Vazão de gás (kg/s)	Inversão térmica (Sim ou Não)	Condição de operação (Normal ou Falha)	Observação
1	A/B	3	389	Não	Normal	Flare inteiro**
2	A/B	3	389	Não	Normal	
3	C	5	-	Não	-	Sem gás
4	C	10	-	Não	-	Sem gás
5	C	5	389	Não	Normal	
6	C	10	389	Não	Normal	
7	D	5	389	Não	Normal	
8	D	10	389	Não	Normal	
9	E	3	389	Não	Normal	
10	E	5	389	Não	Normal	
11	F	3	389	Não	Normal	
12	D	5	389	Sim	Normal	
13	E	3	389	Sim	Normal	
14	E	5	389	Sim	Normal	
15	F	3	389	Sim	Normal	
16	A/B	3	156	Não	Normal	
17	C	5	156	Não	Normal	
18	C	10	156	Não	Normal	
19	D	5	156	Não	Normal	
20	D	10	156	Não	Normal	
21	E	3	156	Não	Normal	
22	E	5	156	Não	Normal	
23	F	3	156	Não	Normal	
24	D	5	156	Sim	Normal	
25	E	3	156	Sim	Normal	
26	E	5	156	Sim	Normal	
27	F	3	156	Sim	Normal	
28	A/B	3	156	Não	Falha	
29	A/B	3	389	Não	Falha	
30	D	5	156	Não	Falha	
31	D	5	389	Não	Falha	
32	F	3	156	Não	Falha	

33	F	3	389	Sim	Falha	

* **(v_0)** é a velocidade na altura de referência (10 metros) utilizada na equação do perfil de velocidade do vento (Tabela 13): $v = v_0 \left(\frac{z}{z_0}\right)^w$

** Somente para o Caso 1 foi considerado o *flare* inteiro na geometria, para os demais casos foi considerado apenas o topo do *flare* para não interferir no escoamento do vento e consequentemente na dispersão da pluma.

4.12 Parâmetros para a análise dos resultados

Para a análise da concentração dos gases poluentes e inflamáveis na pluma são considerados os limites de tolerância da Tabela 4 - Tabela de limites de tolerância (Modificada da NR-15 da Portaria n. 3214 de 8/6/1978) e limites de inflamabilidade conforme NFPA 497 (2012) da Tabela 25.

Tabela 25: Limites de inflamabilidade das substâncias presentes no gás de queima (NFPA 497, 2012).

Substância	Limite de Inflamabilidade		Temperatura de Auto-ignição (ºC)
	%LFL	%UFL	
Metano	5	15	600
Etano	3	12,5	472
Eteno	2,7	36	490
Propano	2,1	9,5	450
Propeno	2,4	10,3	460
Butanos	1,9	8,5	288
Butenos	1,6	10	385
Butadieno	2,0	11,5	420
Pentanos	1,5	7,8	243
Dimetilbutano	-	-	405
Hexano	1,1	7,5	225
Heptano	1,0	6,7	204
Nitrogênio	-	-	-
Dióxido de carbono	-	-	-
Água	-	-	-
Amônia	15	28	651
Sulfeto de hidrogênio	4	44	260
Hidrogênio	4	75	500
Monóxido de carbono	12,5	74	609

* %LFL = Limite inferior de inflamabilidade

%UFL = Limite superior de inflamabilidade

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Caso 1

Primeiramente a geometria adotada no estudo em 2 dimensões contemplava o *flare* inteiro como uma barreira ao escoamento, assim como os demais obstáculos encontrados dentro da refinaria. Entretanto, verificou-se que esta consideração não estava representando a realidade do escoamento, visto que o *flare* está localizado próximo à entrada do domínio e esta limitação ao escoamento provoca um impedimento ao fluxo do vento ao longo da região próxima ao solo, como pode ser visto nas Figuras 37 e 38, para a simulação do Caso 1. Na realidade o *flare* não geraria tanta turbulência, devido às suas reduzidas dimensões (2m de diâmetro) e o vento passaria ao redor (circundaria) do *flare* e permaneceria seguindo ao longo do domínio. Esta interferência ocorreu devido ao estudo ser feito em duas dimensões

.

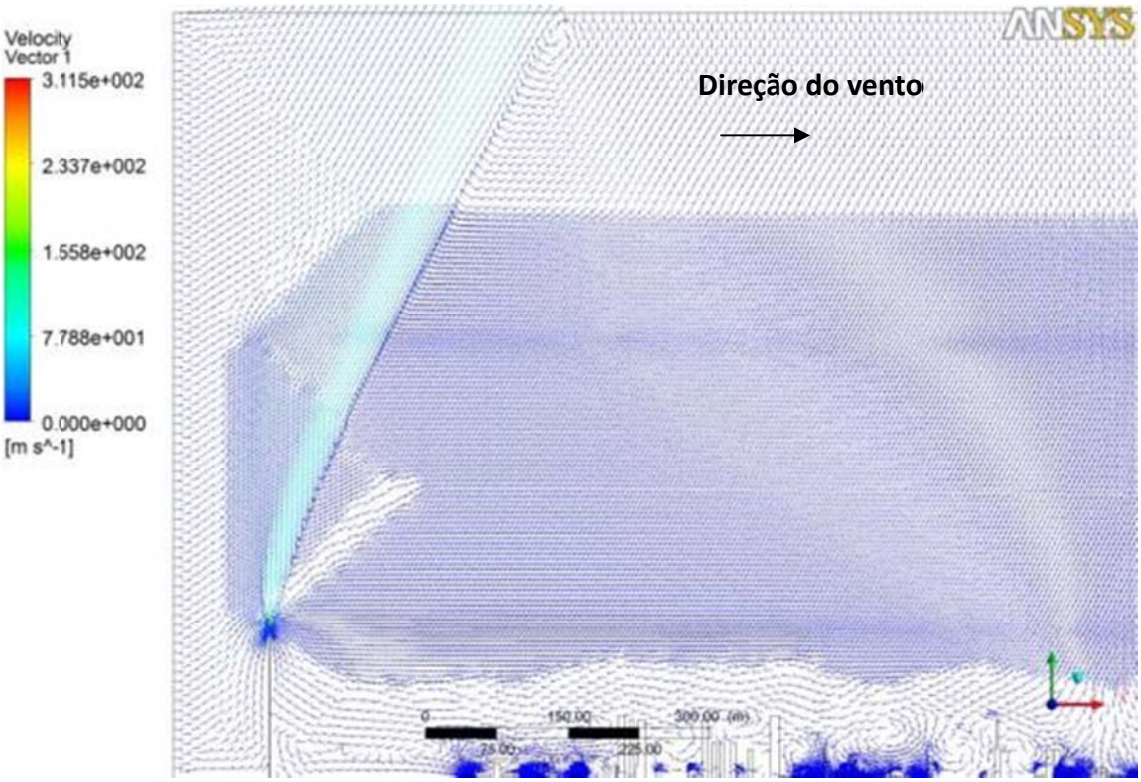


Figura 37: Perfil de velocidade no Caso 1, com o *flare* inteiro.

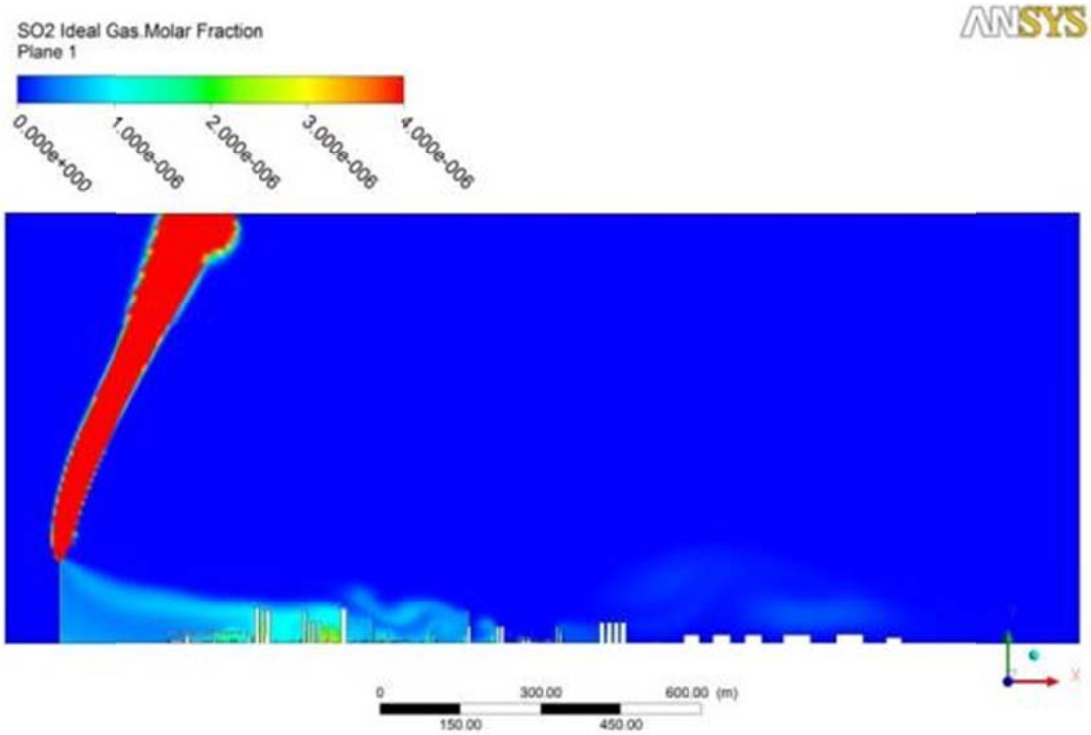


Figura 38: Perfil de concentração da pluma no Caso 1, com o *flare* inteiro.

Dessa forma, apenas uma pequena parte da chaminé do *flare* (topo) passou a ser um obstáculo, porém a altura da tocha foi mantida, ou seja, os gases continuam a ser emitidos na mesma altura em relação ao solo. Esta nova geometria foi, então, adotada para os demais casos. Ver Figura 39.

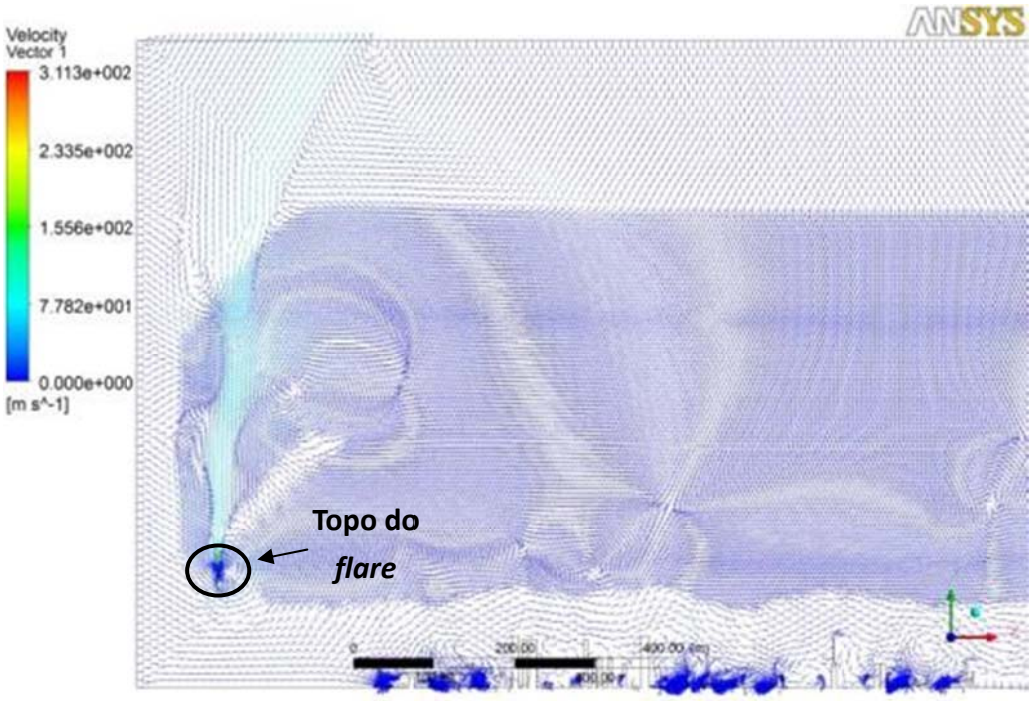


Figura 39: Perfil de velocidades do Caso 2 com indicação do topo do *flare*.

5.2 Caso 2

Para este caso com emissão de 389 kg/s de gases de combustão (vazão de contingência) e atmosfera com classe de estabilidade A/B e vento de 3 m/s a 10 m de altura, verifica-se na Figura 40 que a nuvem tende a subir e se dispersar em alturas bem elevadas, pois o vento não é forte o suficiente para arrastar a pluma que, devido a sua alta vazão, atinge elevada velocidade. O movimento vertical da pluma se sobrepõe ao movimento horizontal imposto pelo vento.

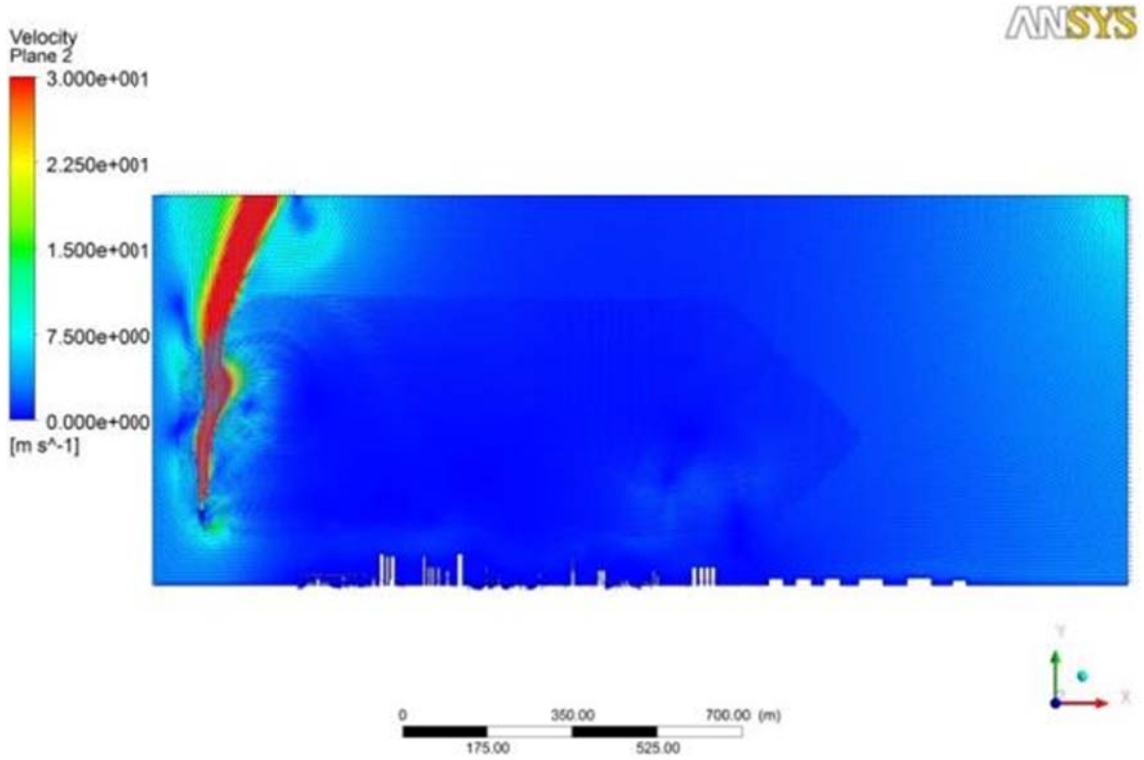


Figura 40: Plano de velocidades do Caso 2.

Verifica-se também que para as classes de estabilidade instáveis (A e B) o perfil de vento em pontos distantes da fonte de emissão está conforme o esperado segundo a expressão do item 4.4 (ver Figura 41(c)). Por outro lado, em regiões próximas ao *flare* verifica-se divergência neste perfil, devido à interferência da elevada velocidade vertical da pluma (ver Figura 41 (b)).

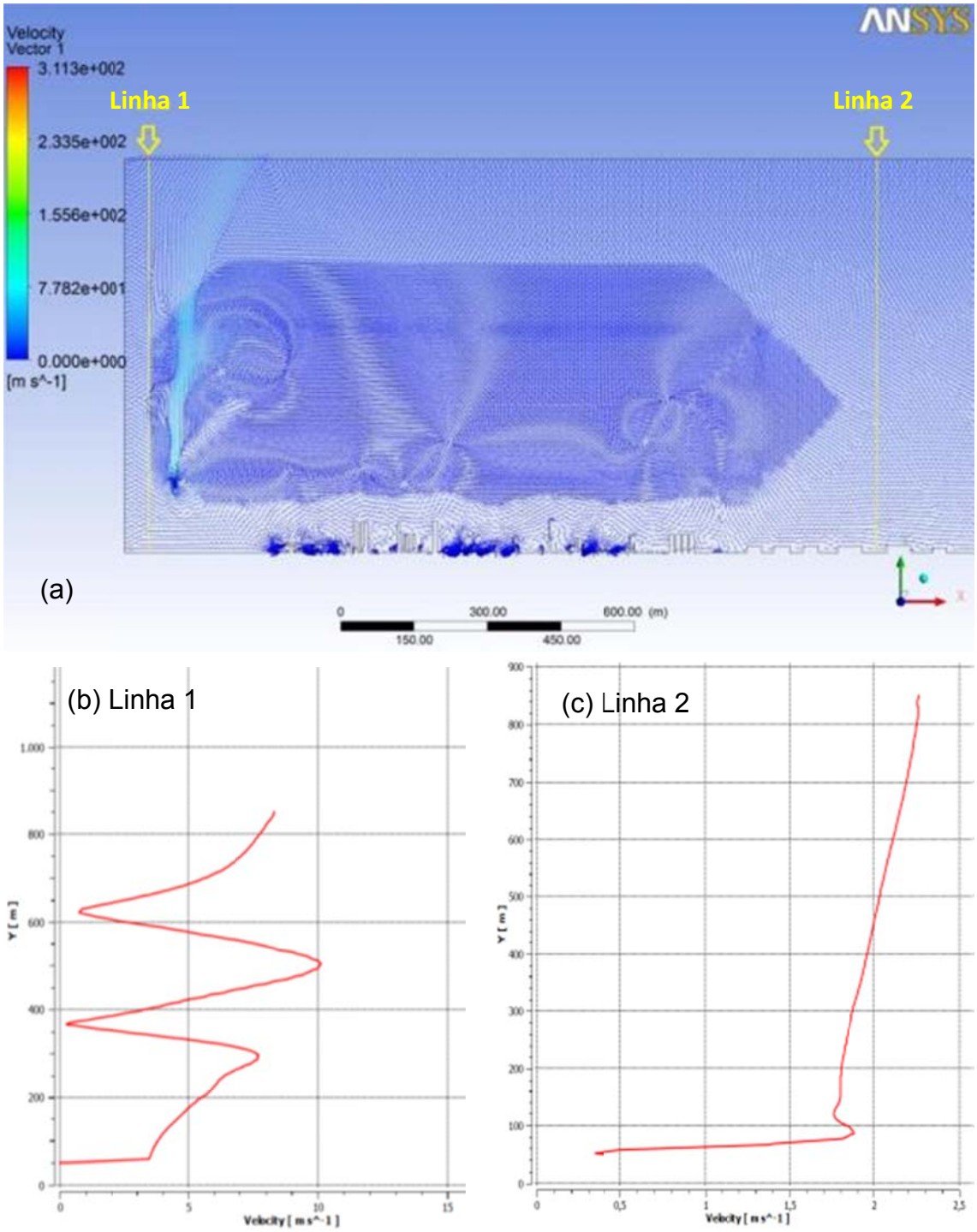


Figura 41: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a); gráfico do perfil de velocidades na entrada (b); e gráfico do perfil de velocidades na saída (c) – Caso 2.

As Figuras 42, 43 e 44 apresentam os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 2. O limite superior das escalas corresponde ao limite de tolerância de cada substância conforme NR-15 (3900 ppm para CO_2, 4 ppm para NO_2 e 4 ppm para SO_2). Estes limites serão adotados em todas as simulações em condições normais de operação.

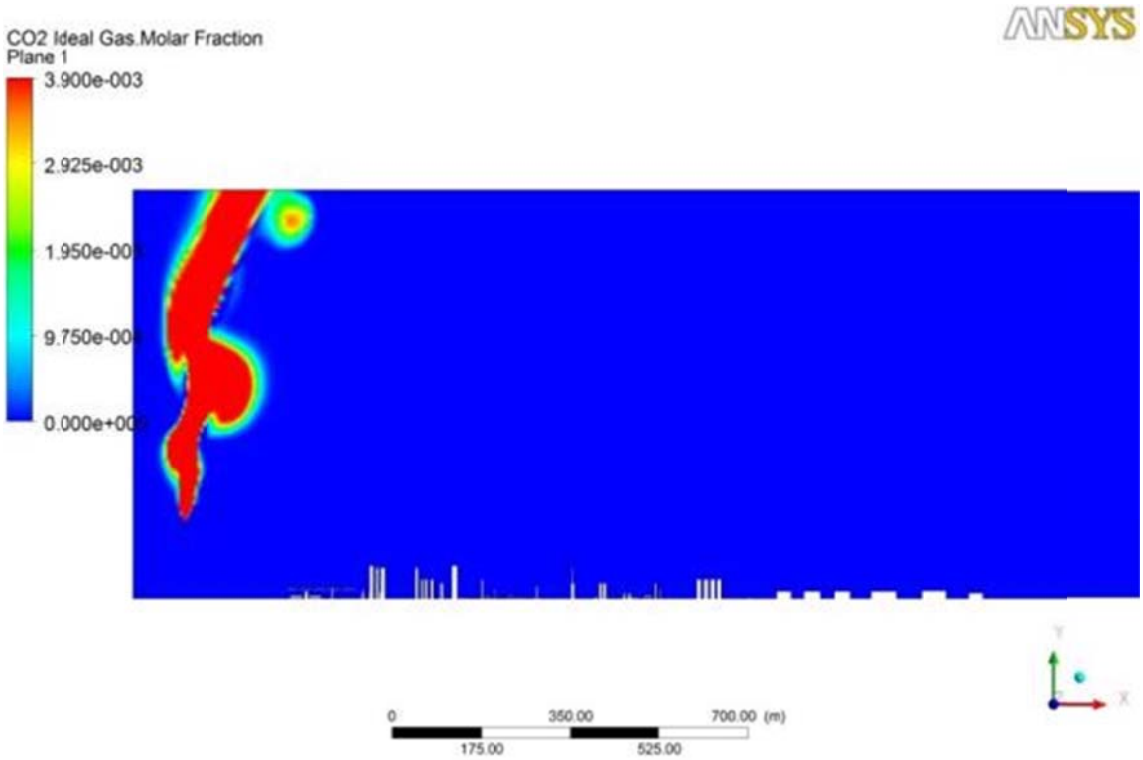


Figura 42: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 2.

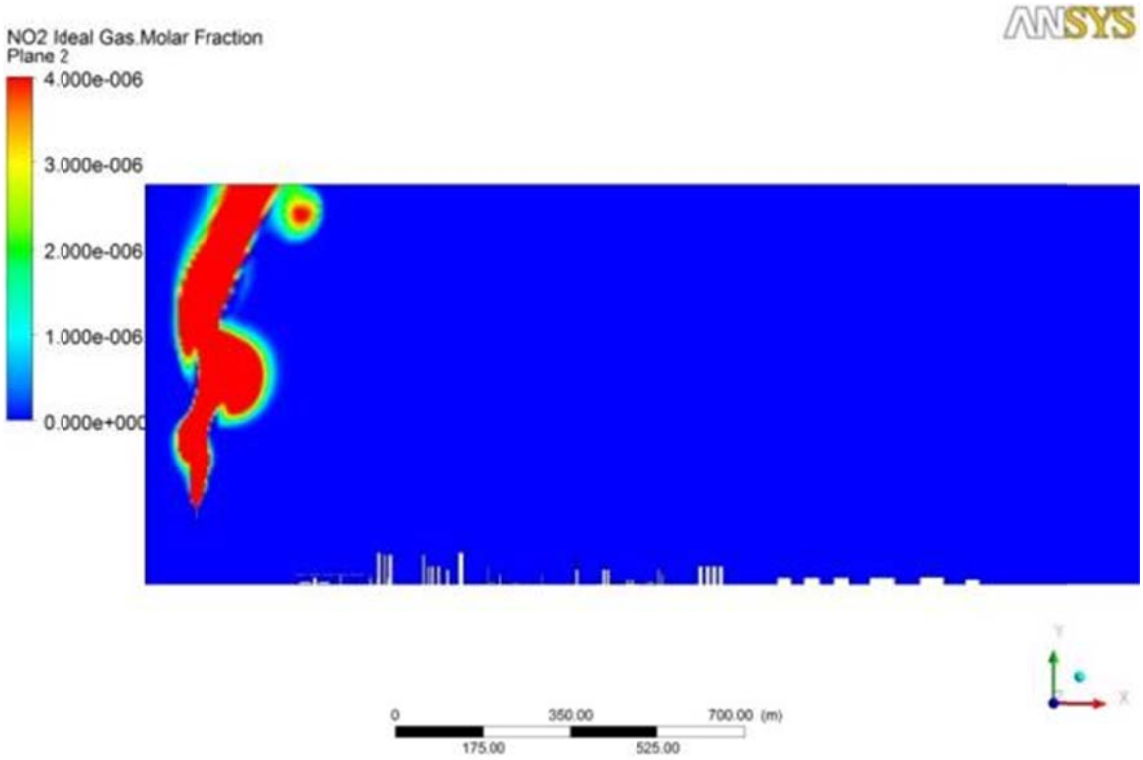


Figura 43: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 2.

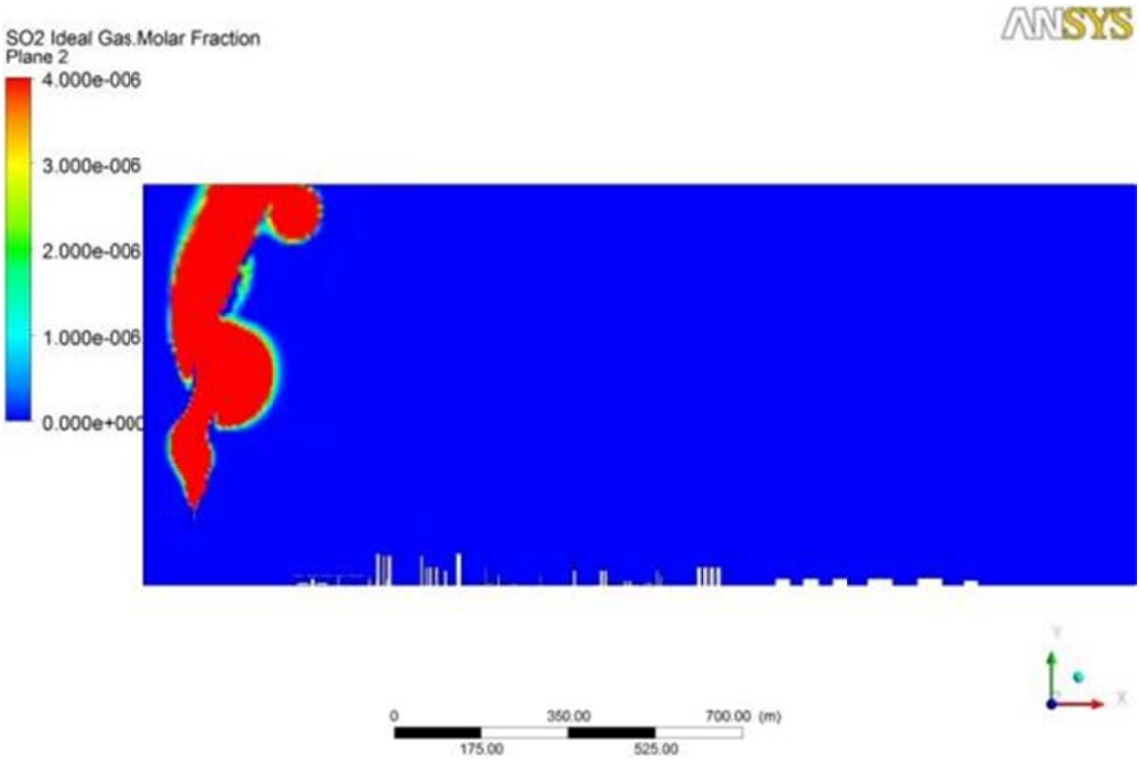


Figura 44: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 2.

Nota-se que classes de estabilidade instáveis (A e B) promovem turbulência ao longo do perfil vertical de escoamento verificado através de vórtices de recirculação apresentados pela pluma.

Cabe ressaltar que nestas condições a pluma não atinge o solo em concentrações que causem impacto à saúde humana.

5.3 Caso 3

Neste caso estudou-se apenas o perfil do vento na classe de estabilidade C (levemente instável) e velocidade do vento com 5 m/s a 10 metros de altura sem a emissão de gases de combustão.

Na Figura 45(a) é possível confirmar que o *flare* tornou-se apenas um pequeno obstáculo gerando um pequeno rastro de baixas velocidades. Entre os equipamentos da refinaria também percebe-se as baixas velocidades e vórtices formados devido ao choque com os obstáculos gerando turbulência.

Ao se comparar o gráfico do perfil de velocidades do vento na entrada do domínio apresentado na Figura 45(b) com a Figura 28, verifica-se grande semelhança indicando boa resposta do *software* e boas considerações adotadas na

simulação.

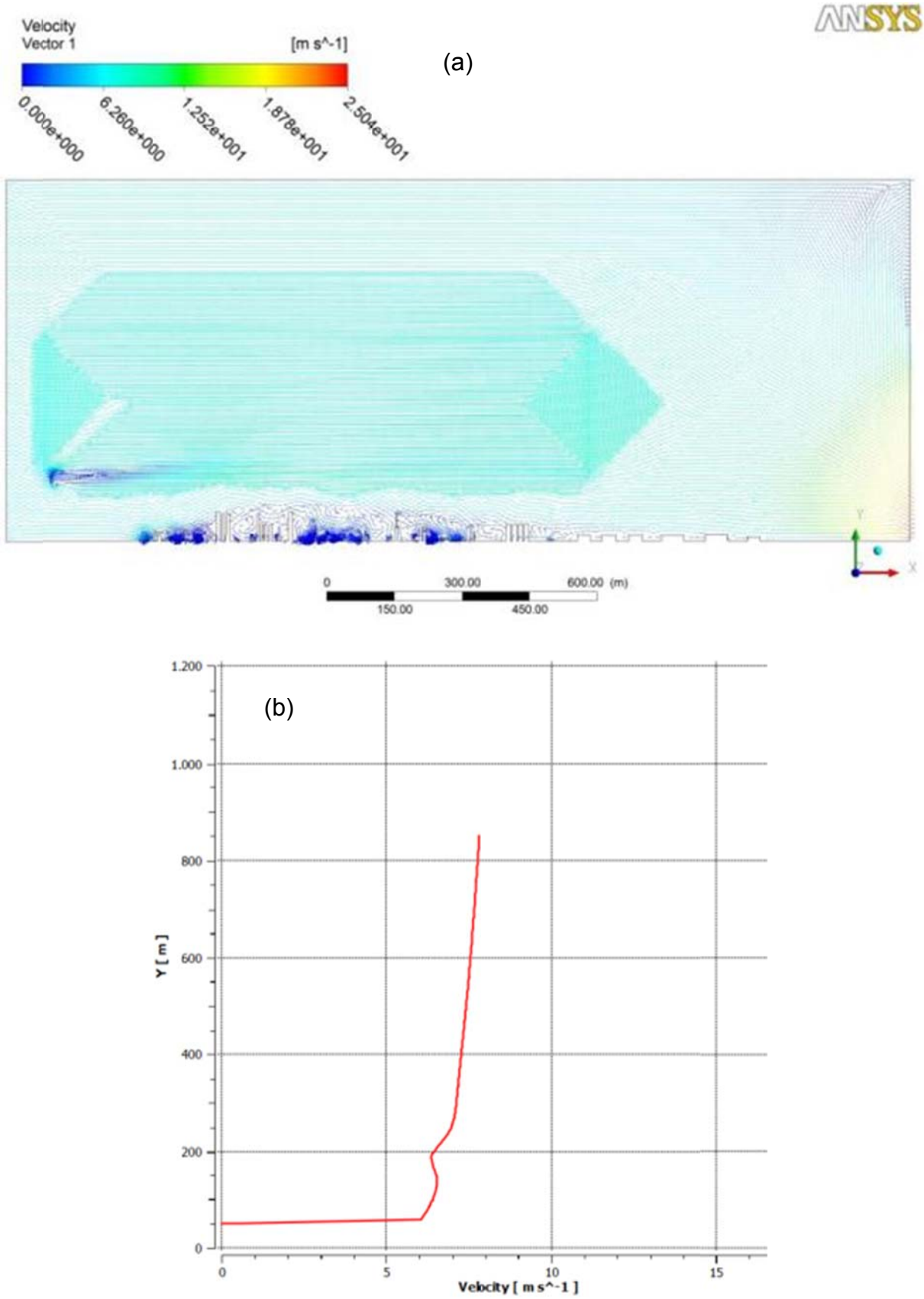


Figura 45: Perfil de velocidades do vento do Caso 3.

5.4 Caso 4

Neste caso também estudou-se apenas o perfil do vento na classe de estabilidade C (levemente instável) sem a emissão de gases de combustão, mas a velocidade do vento adotada foi de 10 m/s a 10 metros de altura.

Nas Figuras 46(a) e 46(b) verifica-se o mesmo comportamento de turbulência e semelhança com a Figura 28 descrito no Caso 3, no entanto, atingindo maiores velocidades.

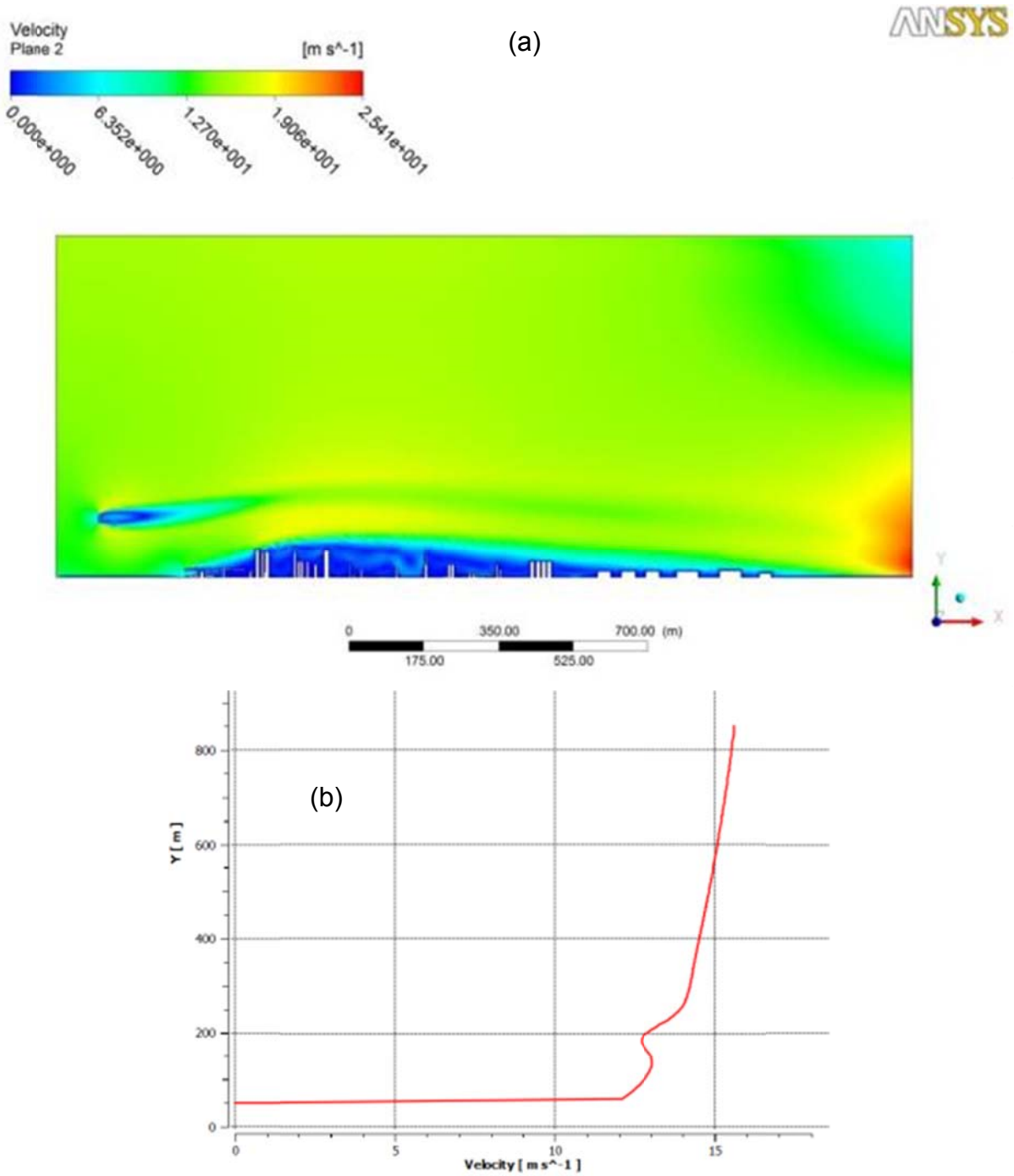
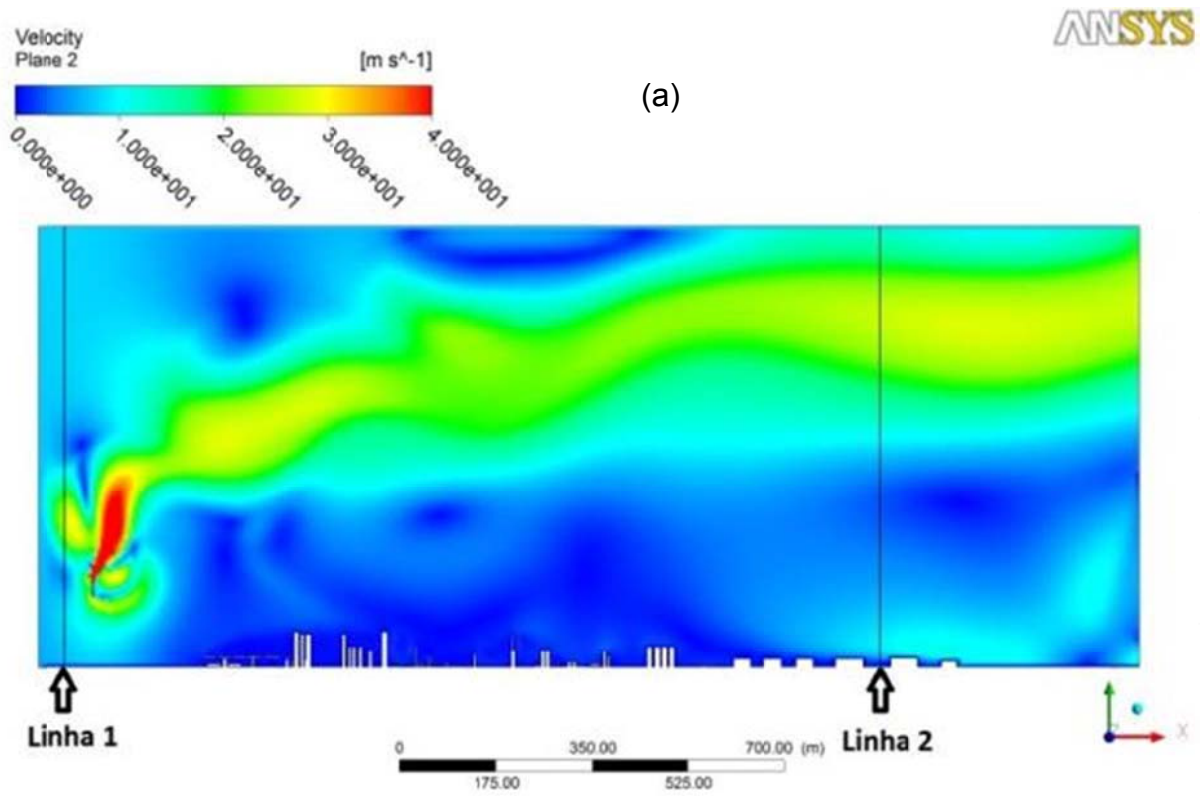


Figura 46: Perfil de velocidades do vento do Caso 4.

5.5 Caso 5

Para o Caso 5, que em relação ao Caso 2, variou-se a classe de estabilidade para C (levemente instável) e a velocidade do vento para 5 m/s a 10m de altura e manteve a vazão máxima de projeto, verifica-se que o vento já se torna capaz de arrastar a pluma.

Nota-se que esse vento com maior velocidade perpendicular à direção dos gases emitidos provoca maior turbulência nesse encontro o que proporciona um perfil de velocidades mais altas entre 200 e 600 m de altura como pode ser visto na Figura 47(b) e para altitudes menores que 200m e maiores que 600m o perfil de velocidades se aproxima do apresentado na Figura 28 (ver Figura 47(c)).



(a)

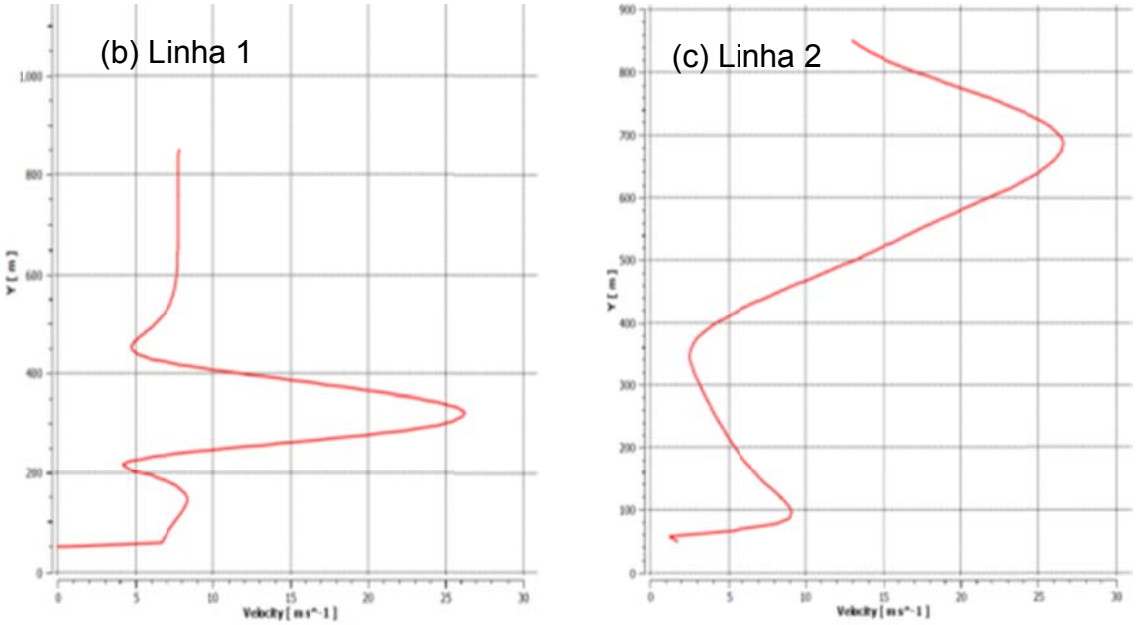


Figura 47: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a); gráfico do perfil de velocidades na entrada (b); e gráfico do perfil de velocidades na saída (c) – Caso 5.

A seguir estão as Figuras 48, 49 e 50 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 5.

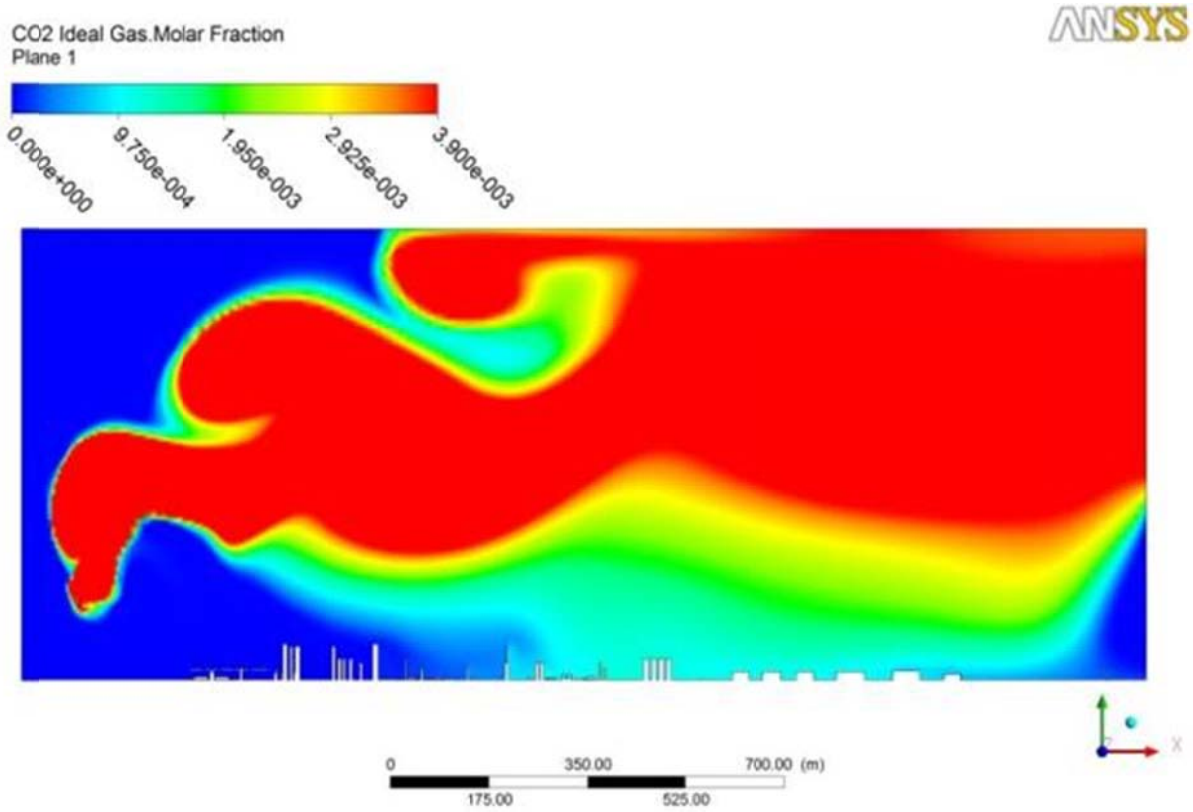


Figura 48: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 5.

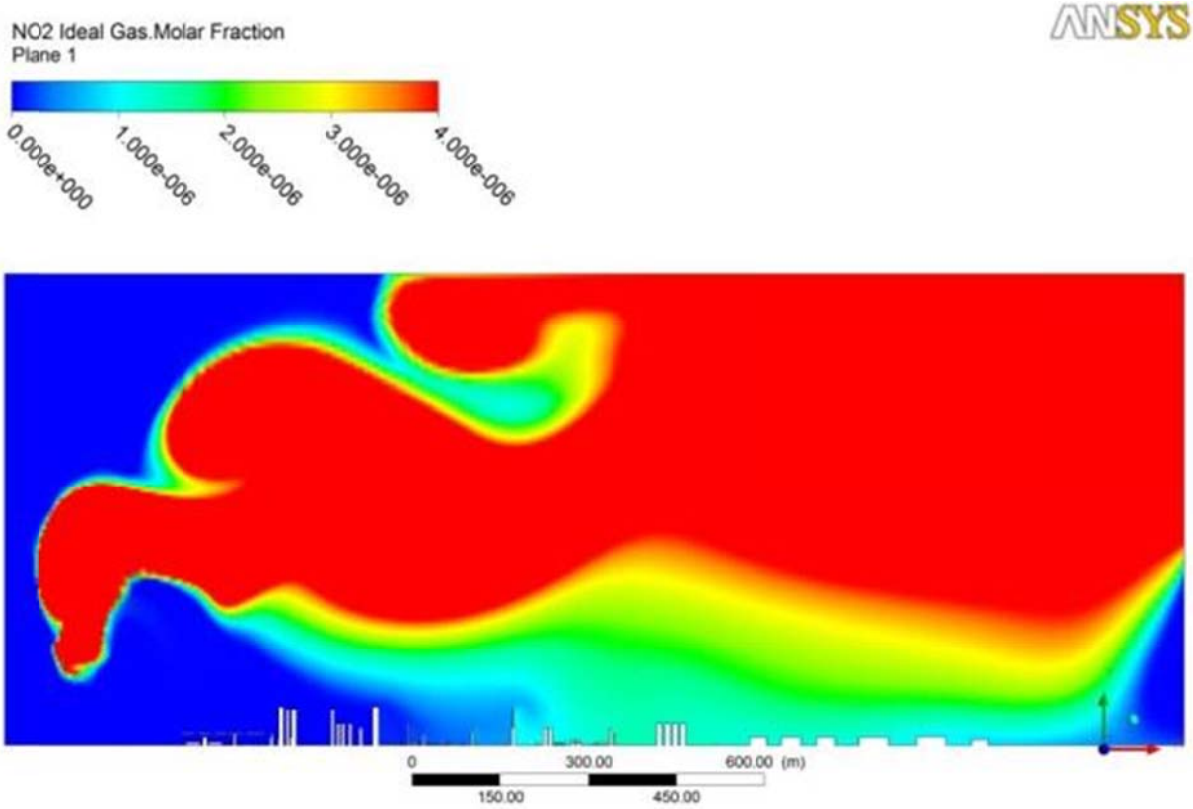


Figura 49: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 5.

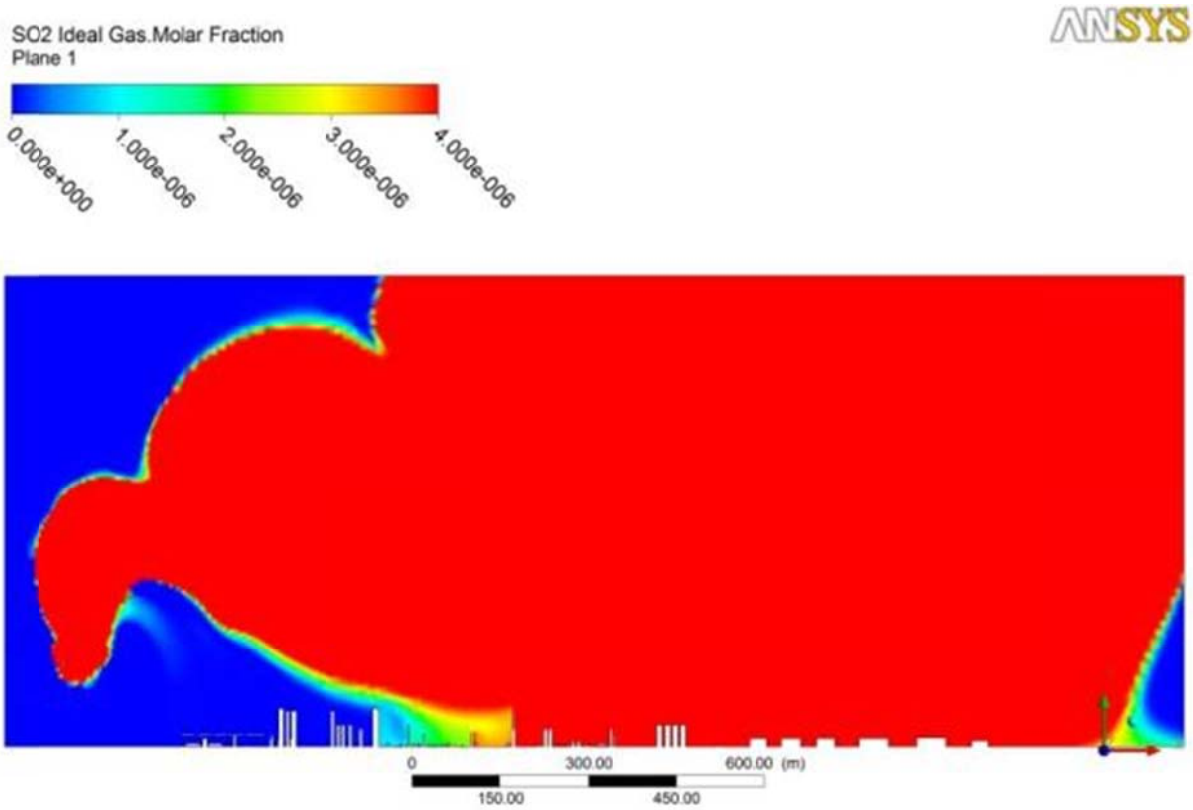


Figura 50: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 5.

Vale atentar que o perfil da pluma - turbulenta e oscilando na direção vertical - está semelhante ao esperado para atmosfera instável conforme Figura 12.

Com uma velocidade de vento capaz de arrastar a pluma ao longo do domínio, verifica-se que concentração acima do limite de tolerância estabelecido pela norma brasileira para o dióxido de enxofre é encontrada no nível do solo, a partir da distância de 750 m do *flare,* e inclusive atingindo longas distâncias, além dos limites da refinaria. Cabe ressaltar que para CO_2 e NO_2 são encontradas, no nível do solo, concentrações que conforme NR-9 caracterizam-se como nível de ação, ou seja, valores a partir dos quais devem ser iniciadas ações preventivas de forma a minimizar a probabilidade de que os limites de exposições sejam ultrapassados. O nível de ação corresponde a metade do limite de tolerância da NR-15. Estas ações incluem o monitoramento periódico e o controle médico.

5.6 Caso 6

Ao se elevar ainda mais a velocidade do vento para 10 m/s a 10 m de altura, no Caso 6, mantendo a classe de estabilidade C e vazão de emissão (389 kg/s), verifica-se na Figura 51 que o vento atinge altas velocidades e sem interferência da fonte de emissão no topo do domínio; e que próximo ao *flare* foram geradas duas ondas de altas velocidades (uma na parte do superior e outra na inferior do topo do *flare*).

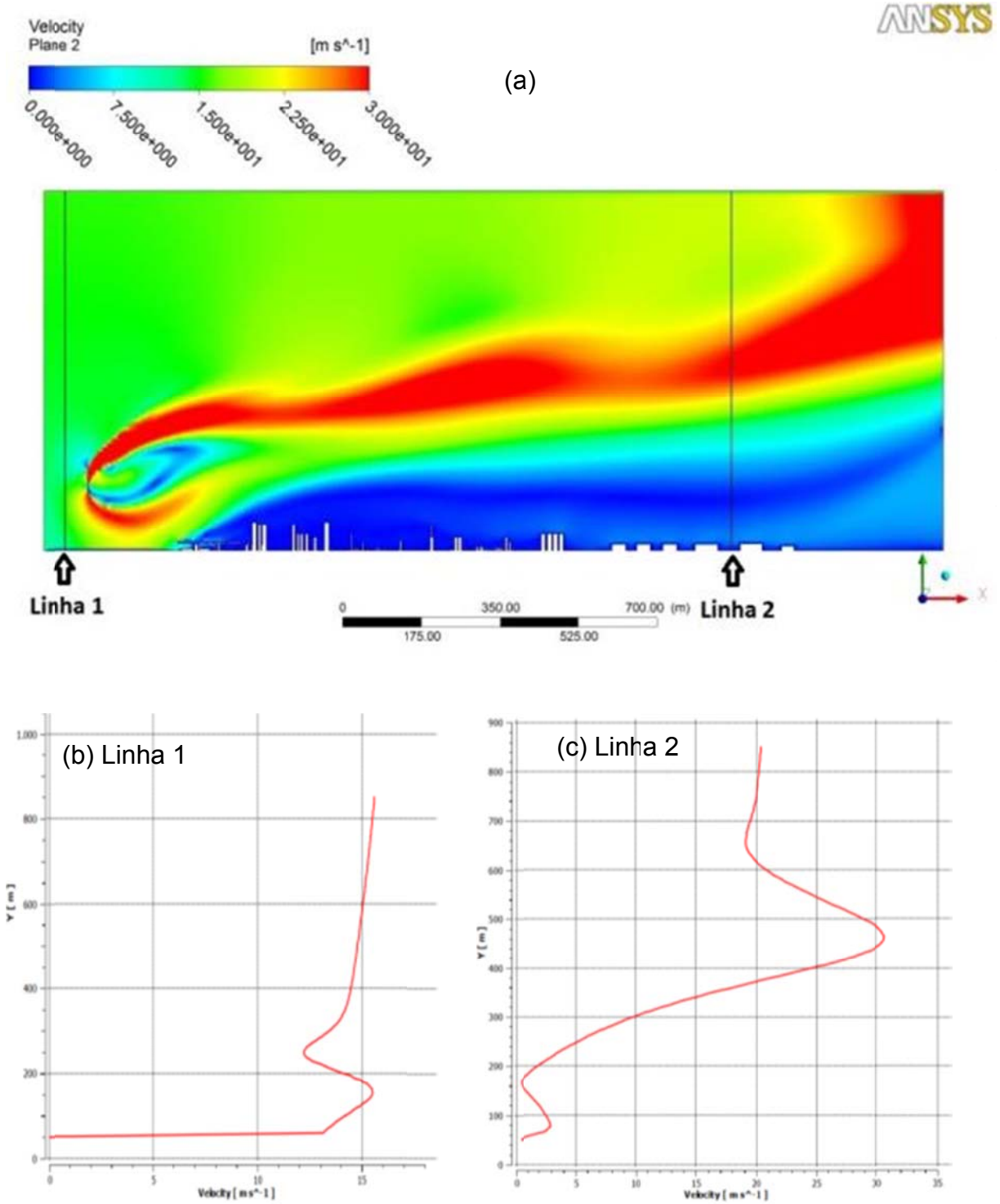


Figura 51: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a); gráfico do perfil de velocidades na entrada (b); e gráfico do perfil de velocidades na saída (c) – Caso 6.

A seguir estão as Figuras 52, 53 e 54 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 6. Nota-se que com a alta velocidade do vento, a pluma é quase totalmente arrastada para longas distâncias e com certa tendência a subir, atingindo o solo somente com concentrações acima de 4 ppm de

SO_2 em determinada região.

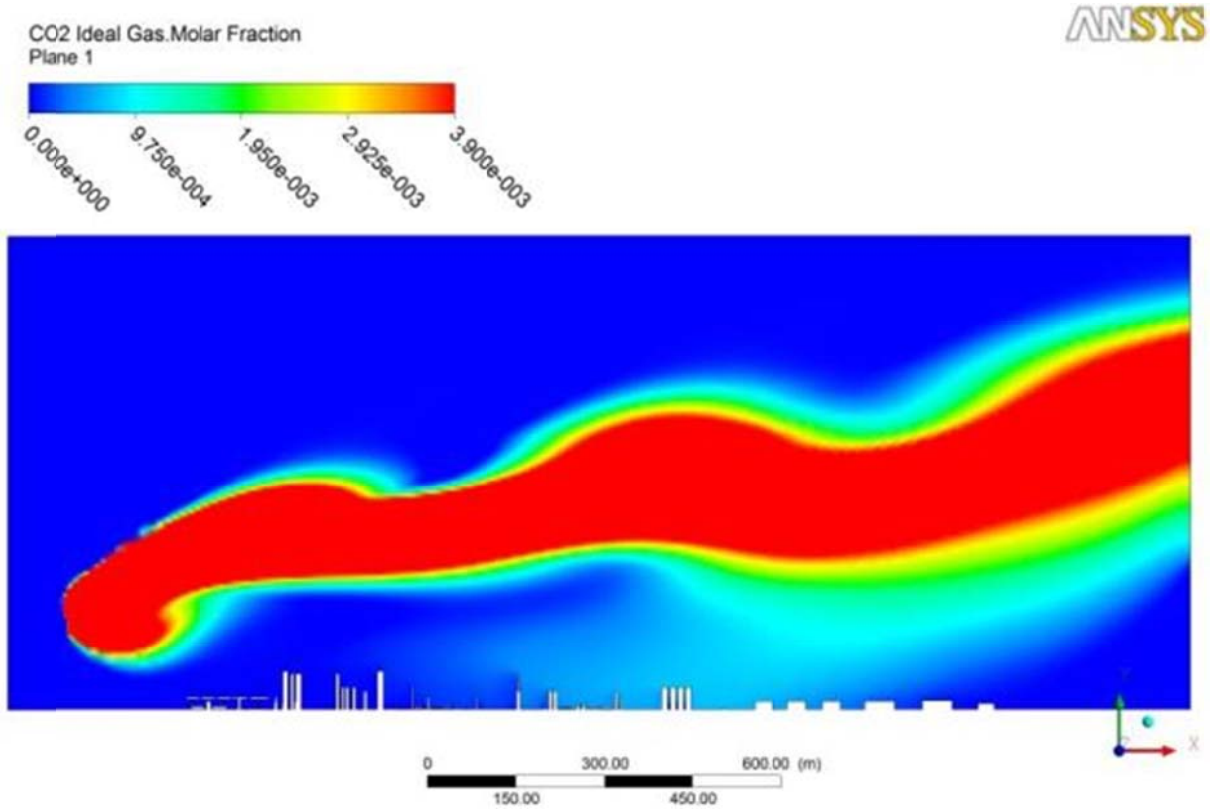


Figura 52: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 6.

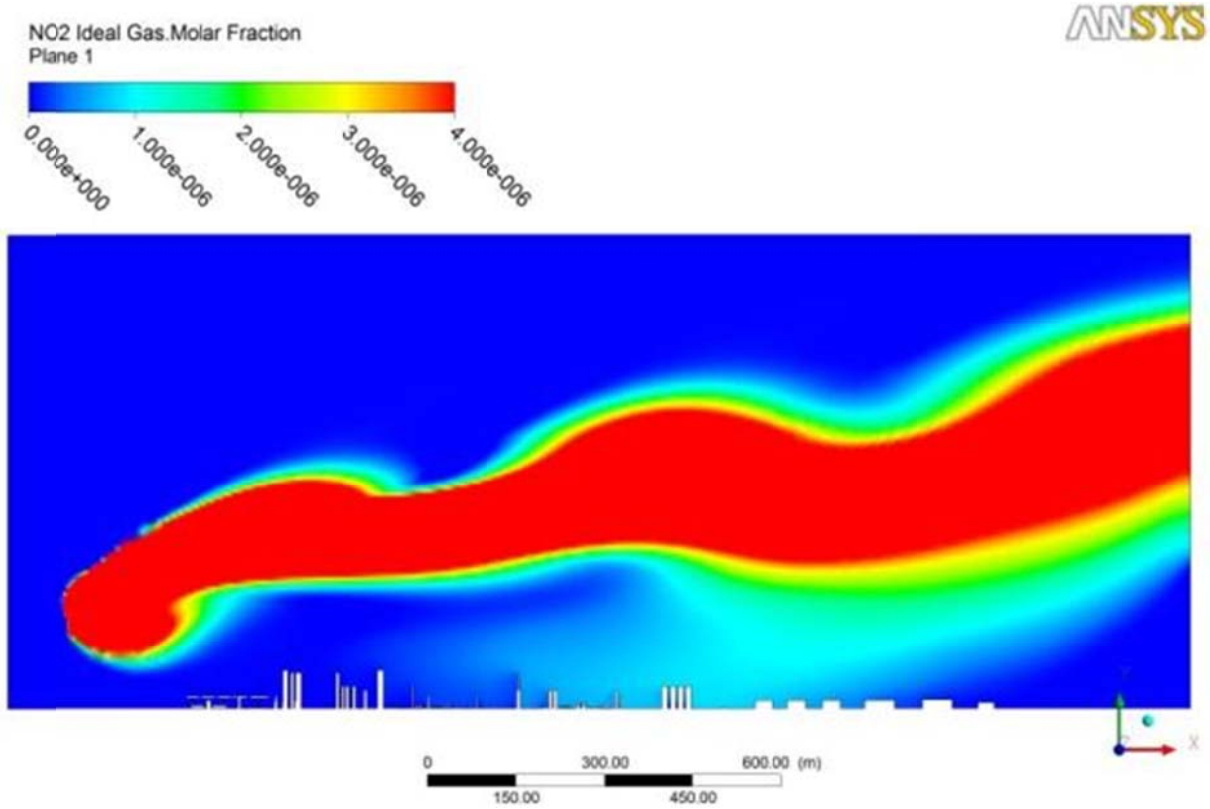


Figura 53: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 6.

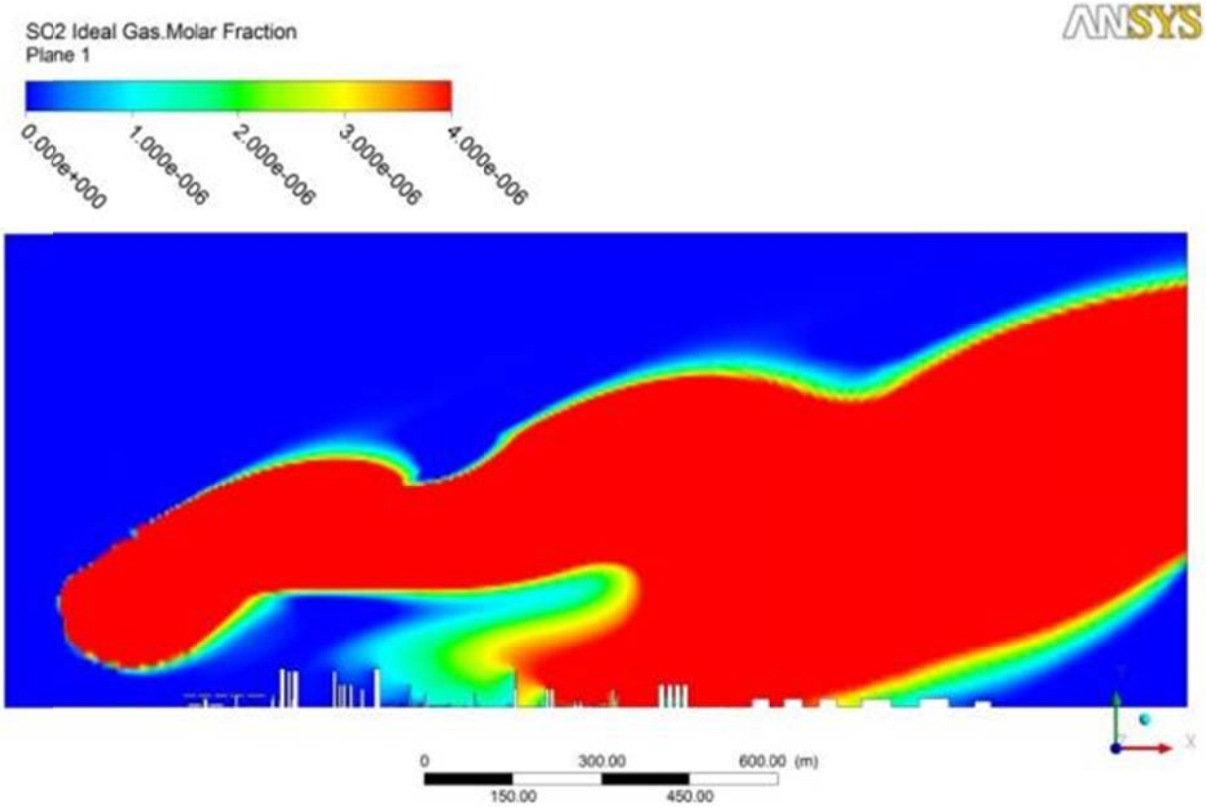


Figura 54: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 6.

Nota-se na Figura 55 que nesta região em que a pluma atinge o solo com concentração de SO_2 igual ou superior ao seu limite de tolerância, há uma recirculação de vento o que pode ter permitido que a pluma alcançasse o solo.

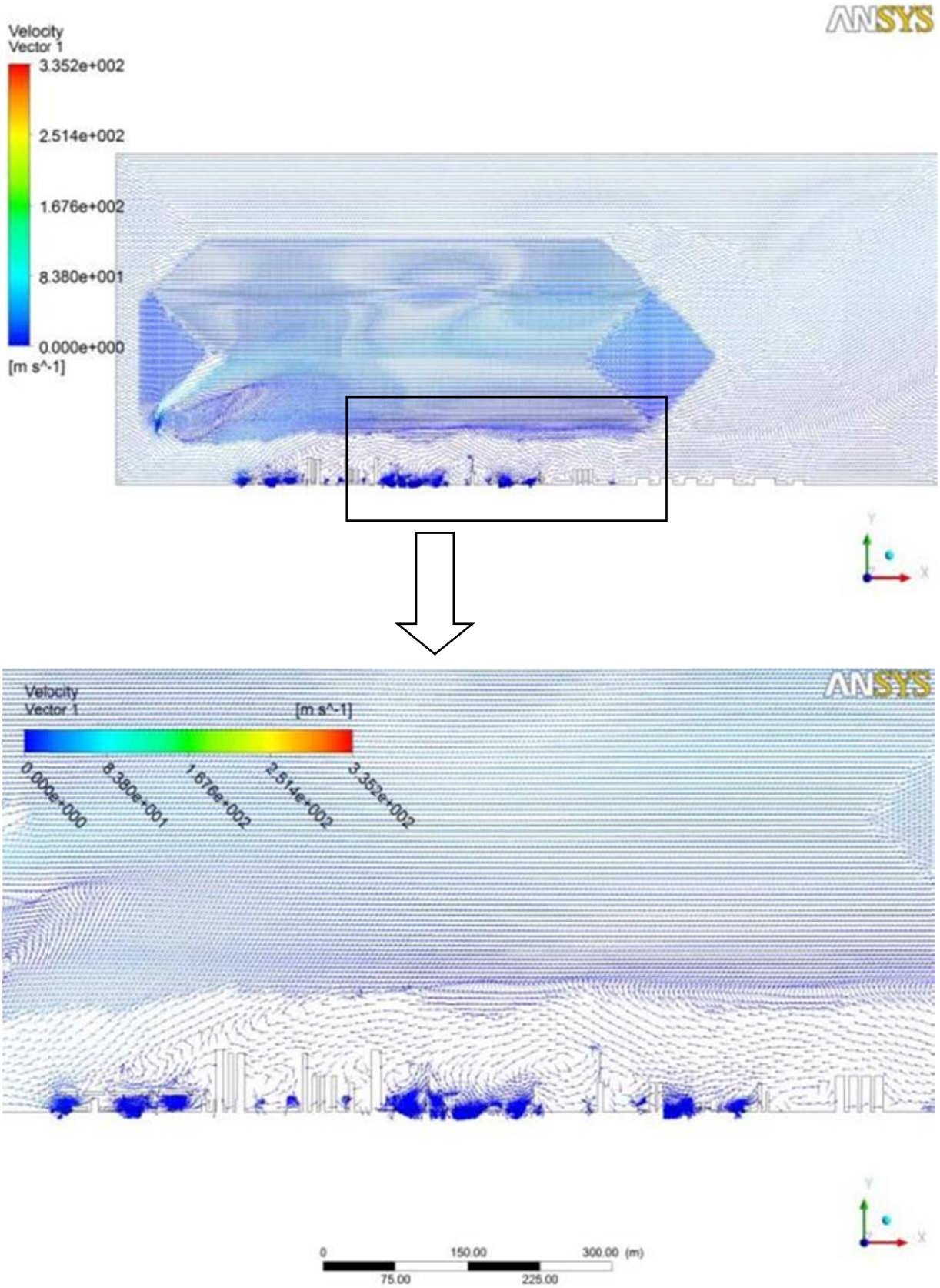
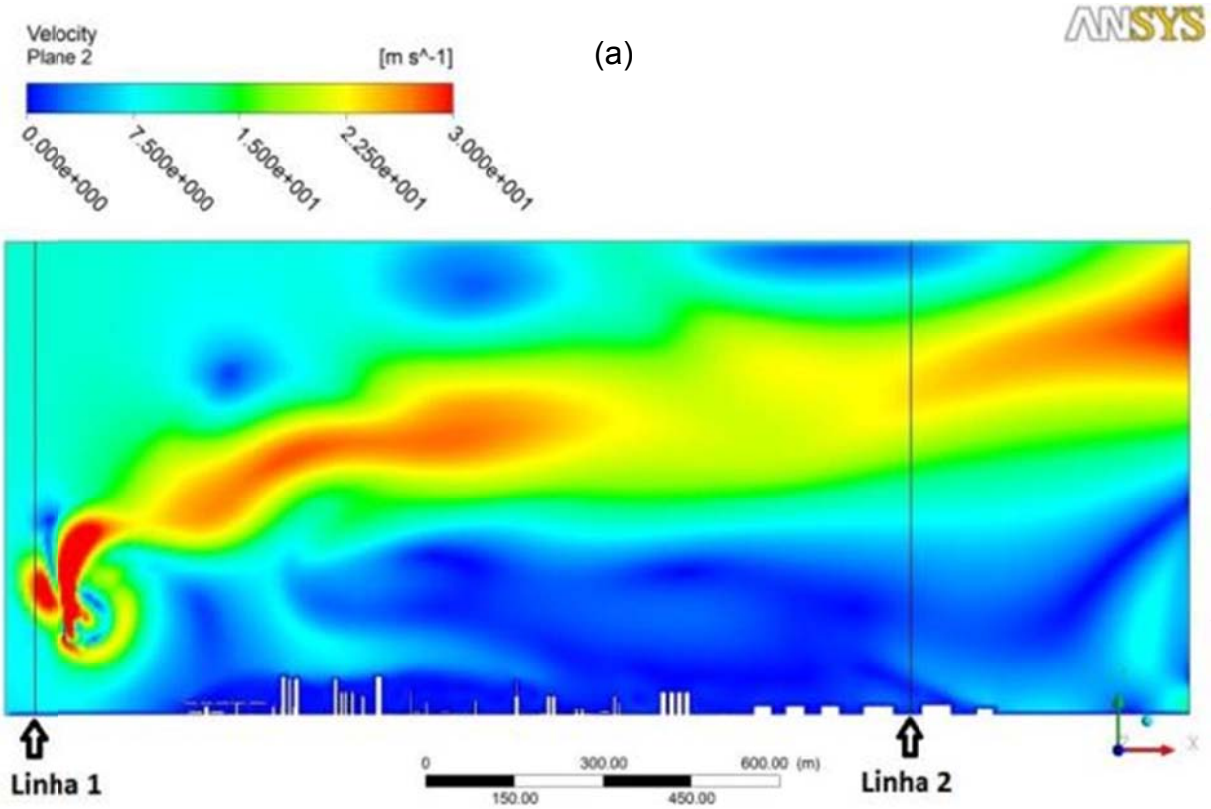


Figura 55: Detalhe do perfil de velocidade no Caso 6.

5.7 Caso 7

Para o Caso 7, em que foi considerada vazão máxima de operação, vento de referência de 5 m/s e que em relação ao Caso 5 variou-se apenas a classe de estabilidade atmosférica para D (neutra), percebe-se que o perfil de velocidade está fortemente afetado pela presença da pluma com características bem diferentes da curva indicada na Figura 28. Ver Figura 56.



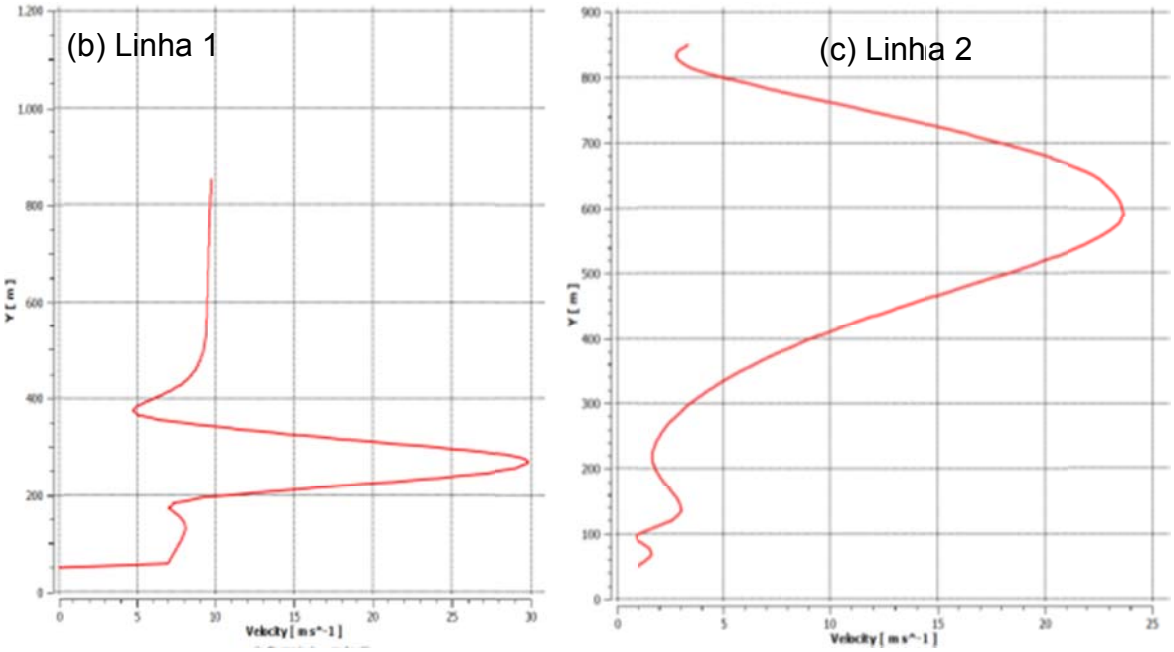


Figura 56: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a); gráfico do perfil de velocidades na entrada (b); e gráfico do perfil de velocidades na saída (c) – Caso 7.

As Figuras 57, 58 e 59 apresentam os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 7.

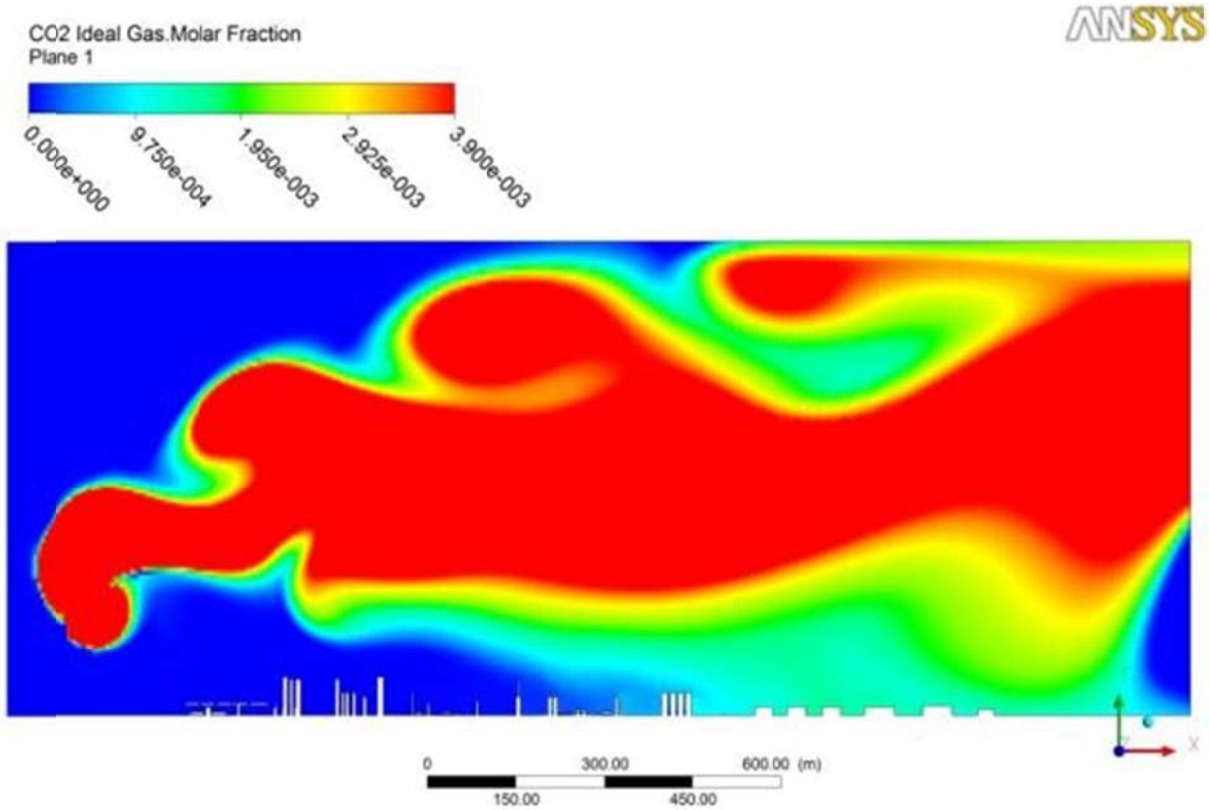


Figura 57: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 7.

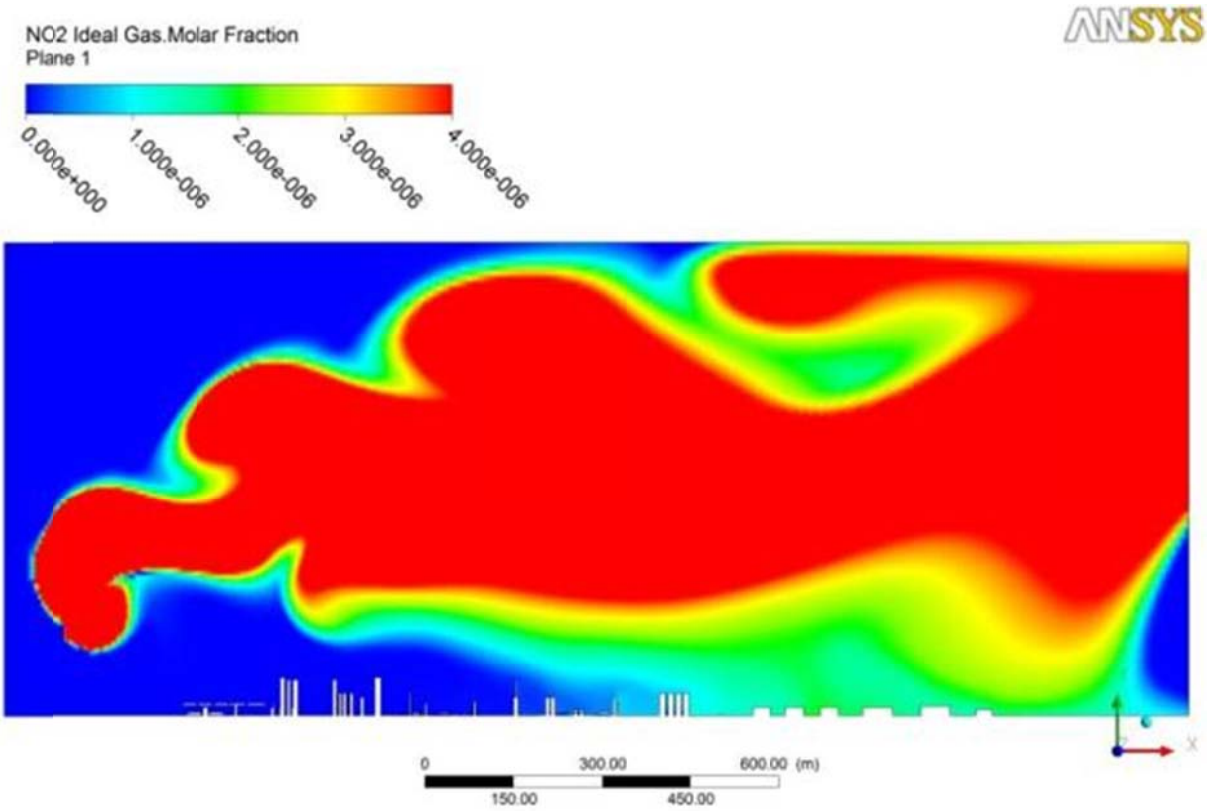


Figura 58: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 7.

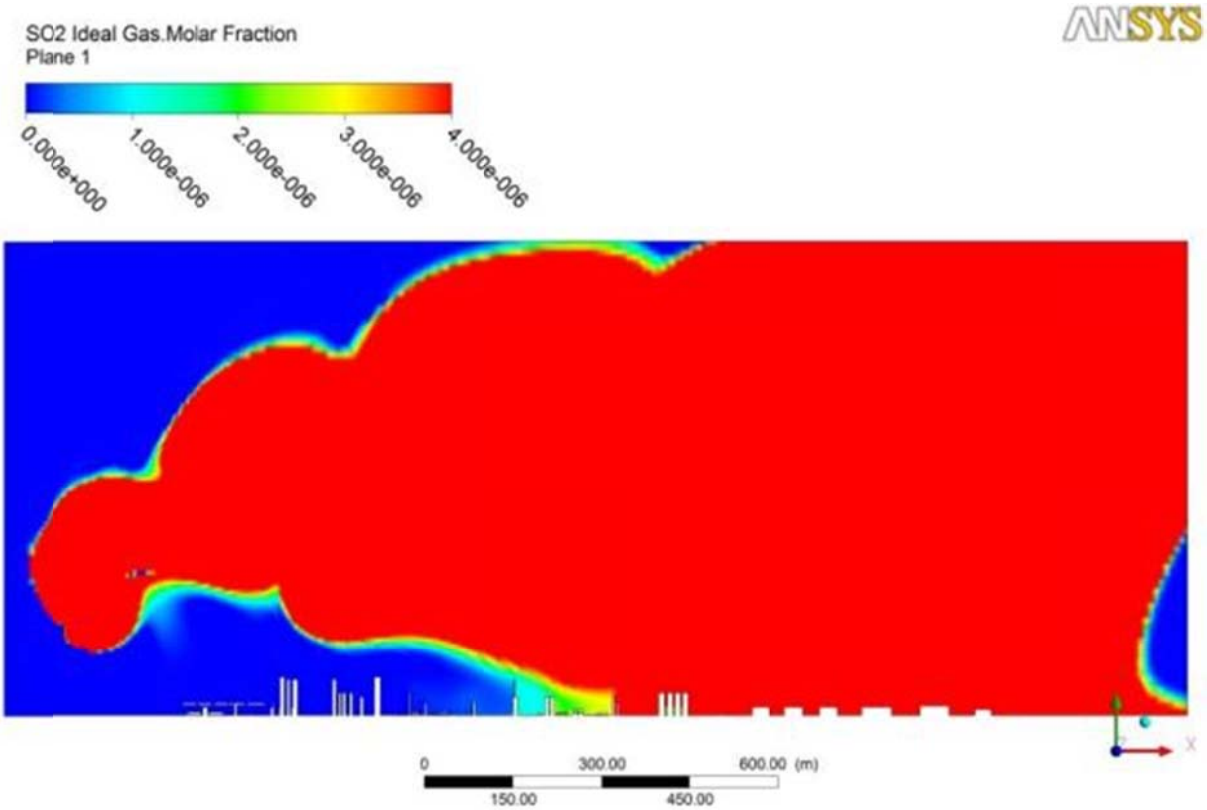


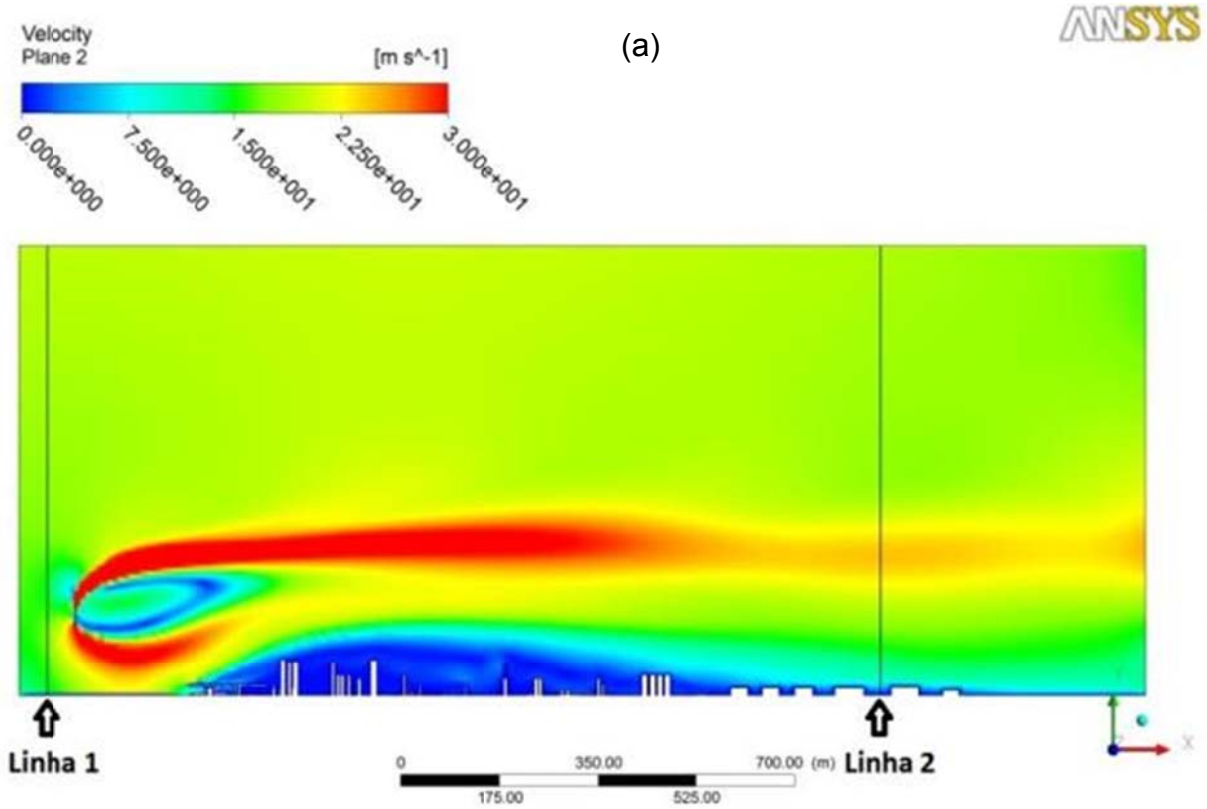
Figura 59: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 7.

Assim como nos casos anteriores, apenas a concentração de SO_2 atinge o solo em nível igual ou superior ao limite de tolerância, neste caso a aproximadamente 900 metros de distância do *flare*. Concentrações de CO_2 e NO_2, no nível de ação, são encontradas na proximidade do solo.

5.8 Caso 8

Este caso é semelhante ao Caso 7 com classe de estabilidade D e vazão de contingência (389 kg/s), aumentando apenas a velocidade do vento para 10 m/s a 10m de altura.

Na Figura 60 verifica-se que, exceto com relação às interferências da fonte de emissão, o perfil de velocidade assemelha-se ao apresentado na Figura 28.



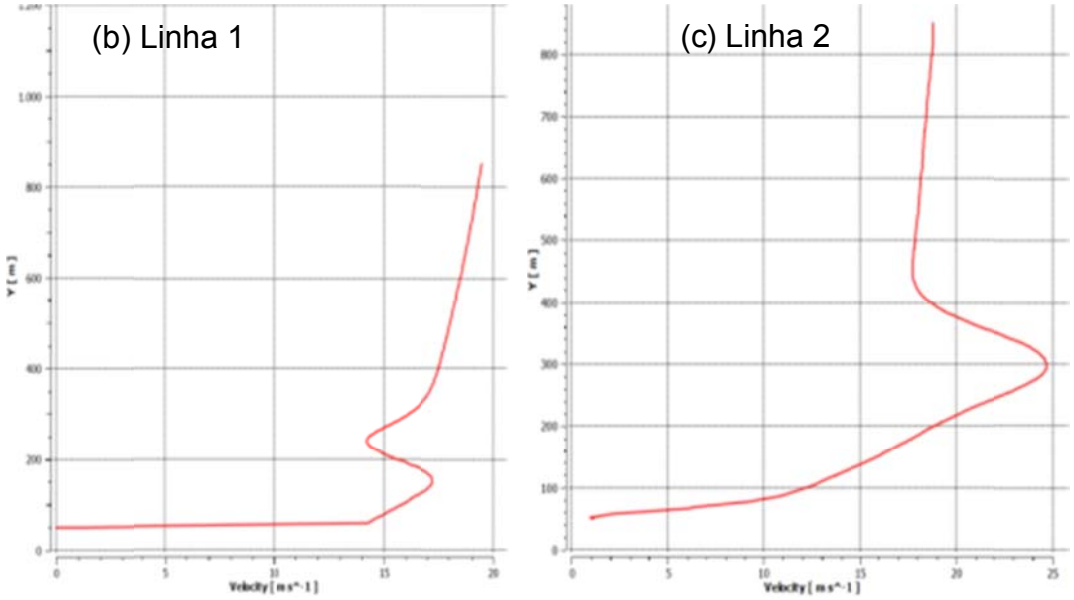


Figura 60: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a); gráfico do perfil de velocidades na entrada (b); e gráfico do perfil de velocidades na saída (c) – Caso 8.

A seguir, estão as Figuras 61, 62 e 63 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 8. Nota-se que, assim como no Caso 6, a alta velocidade do vento arrasta a pluma a longas distâncias.

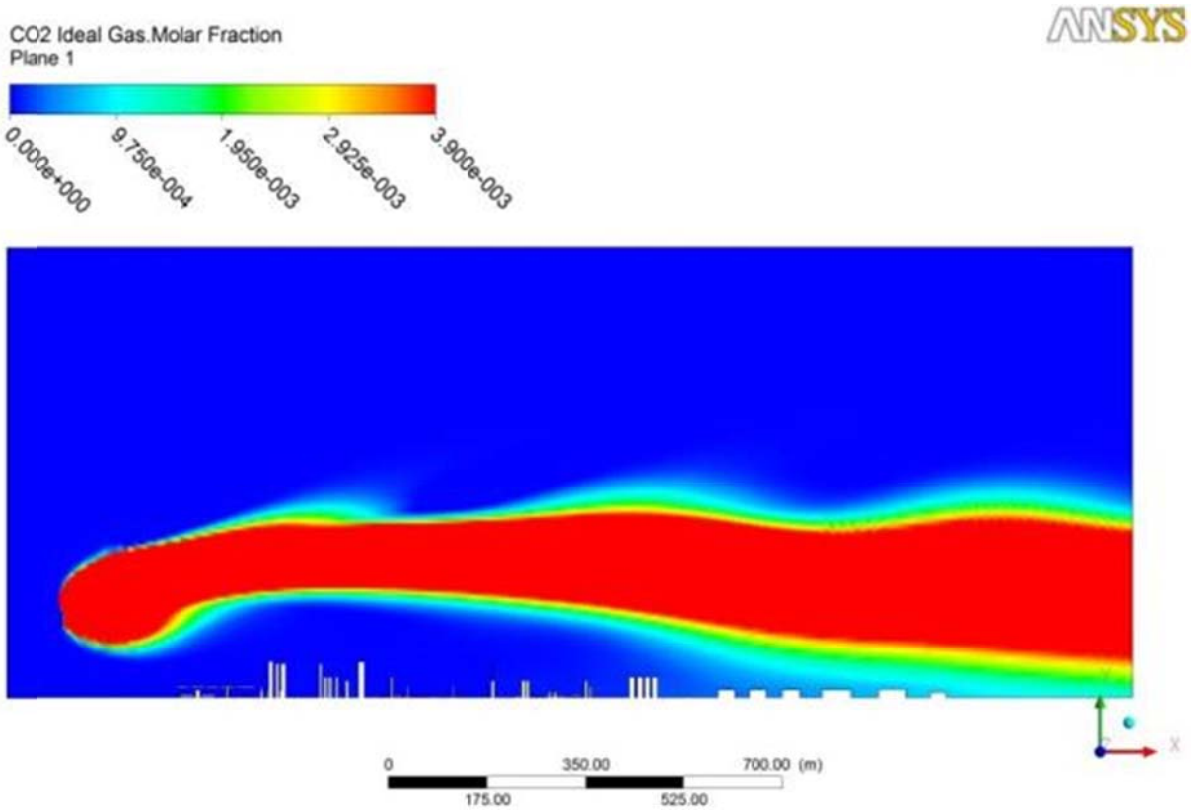


Figura 61: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 8.

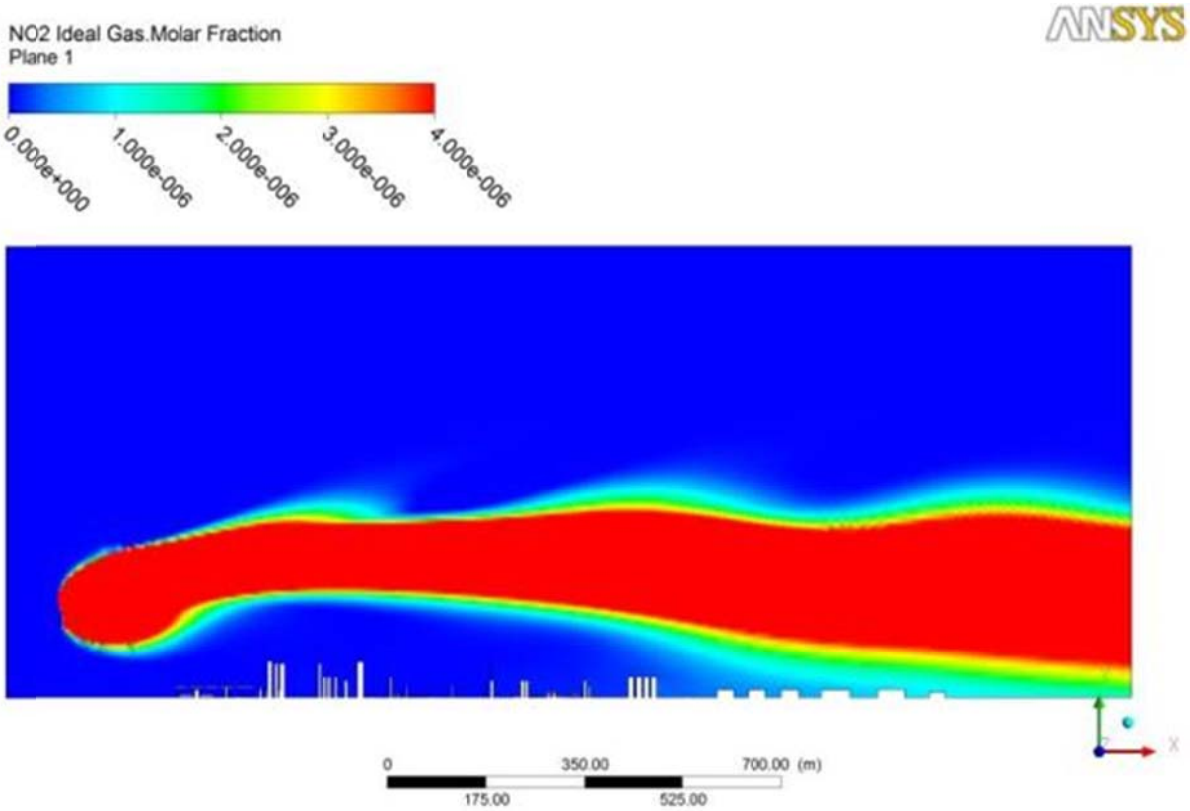


Figura 62: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 8.

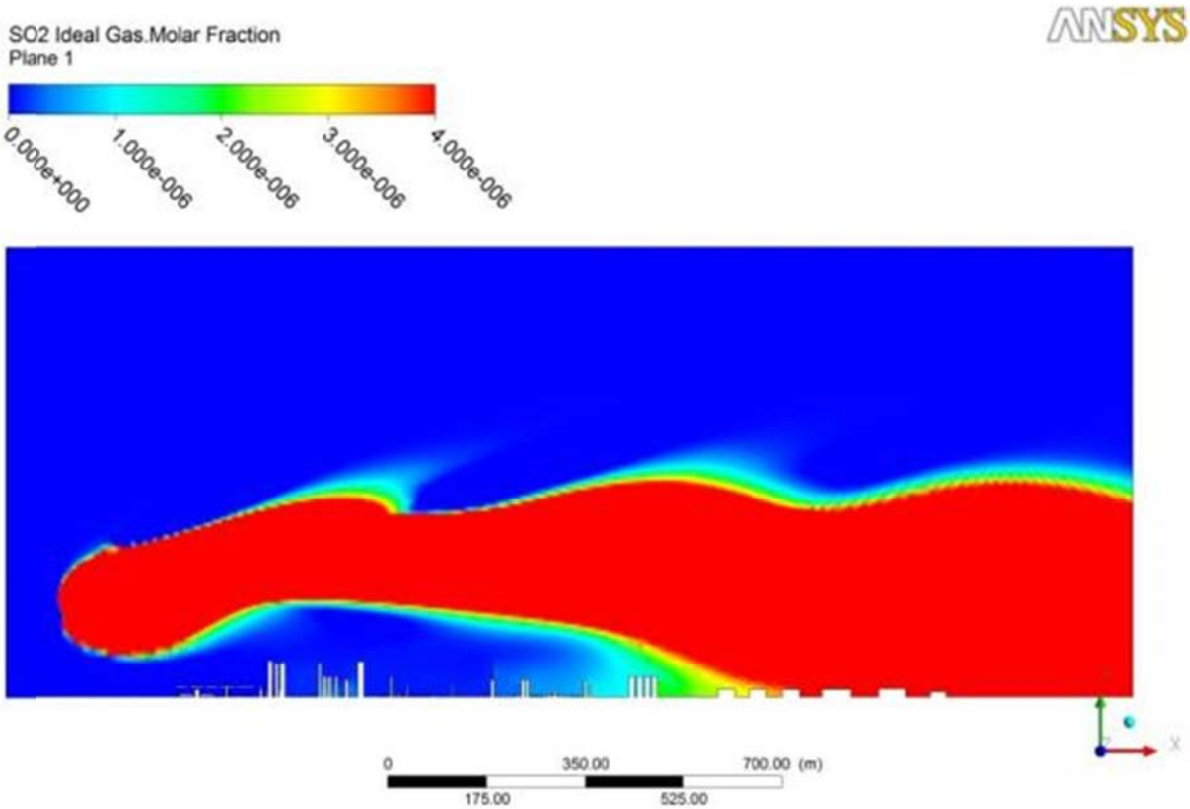


Figura 63: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 8.

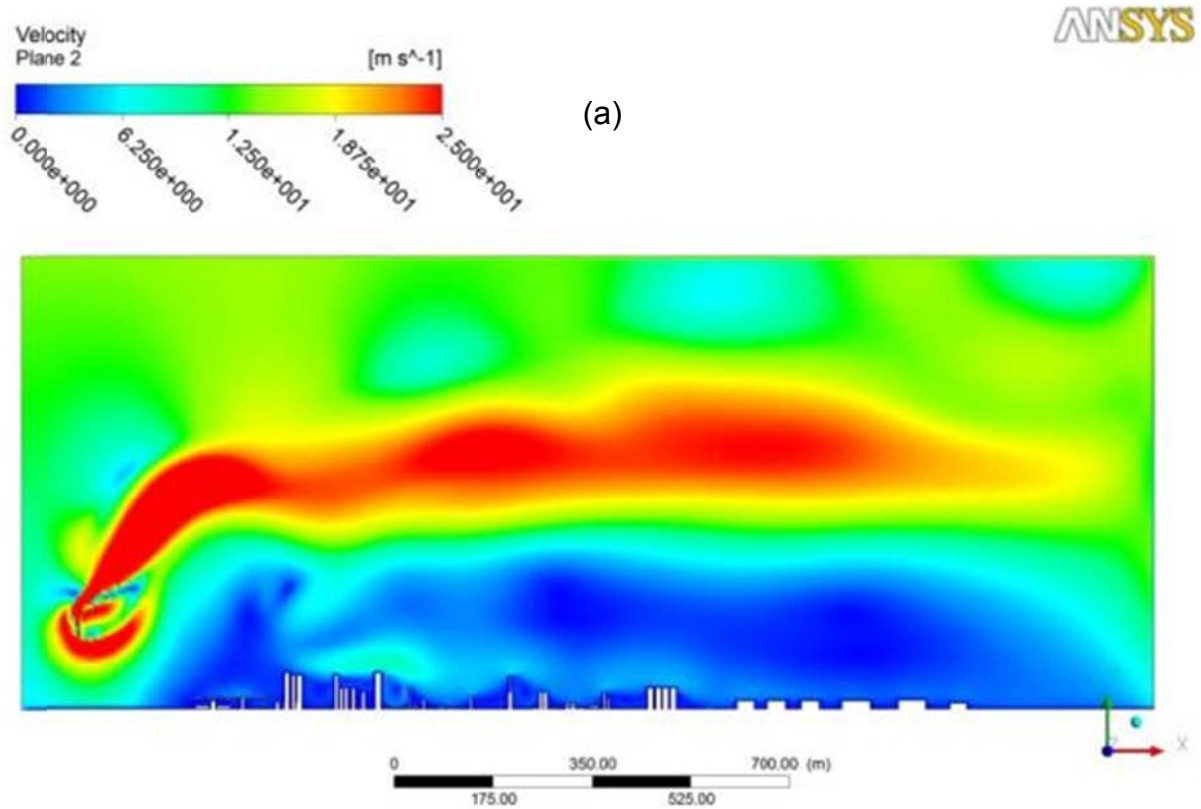
Cabe ressaltar que conforme mostrado na Figura 12, com atmosfera em estabilidade neutra, a pluma tende a um perfil cônico. A nuvem atinge o solo a aproximadamante 1,72 km de distância do *flare* com concentração de SO_2 igual ou superior ao limite de tolerância e tende a atingir as concentrações limites de CO_2 e NO_2 a distâncias maiores que 2 km.

Verifica-se que devido às altas velocidades alcançadas em elevadas altitudes, por conta da classe de estabilidade atmosférica, o vento consegue arrastar a pluma que assume a tendência a descer. Isto explica a grande influência da variação do vento de referência na dispersão dos poluentes, evidenciada ao se comparar os Casos 7 e 8.

5.9 Caso 9

Neste caso estudou-se a classe de estabilidade para E (levemente estável) com velocidade do vento igual a 3 m/s a 10m de altura e vazão de contingência (389 kg/s).

Na Figura 64(b) percebe-se que o perfil do vento corresponde ao apresentado na Figura 28, exceto as interferências causadas pela fonte de emissão entre 100 e 400m de altura.



(a)

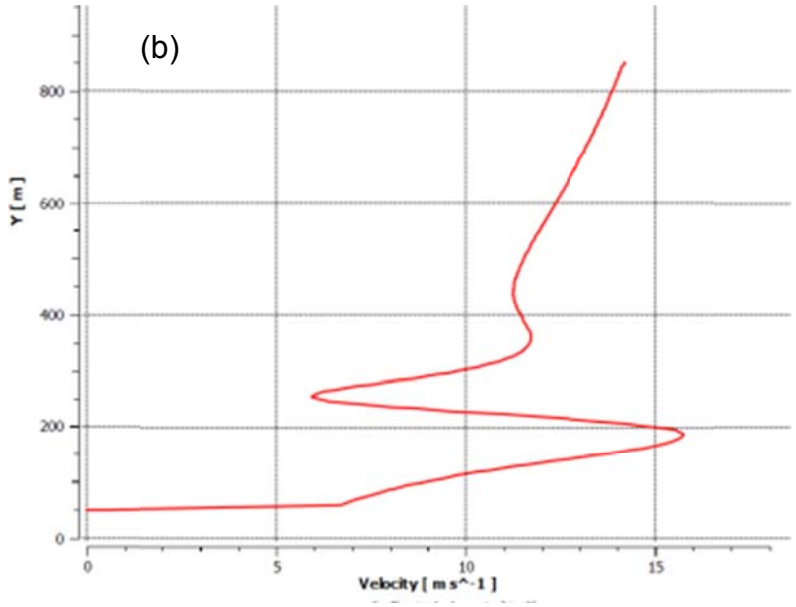


Figura 64: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a) e gráfico do perfil de velocidade na entrada (b) – Caso 9.

As Figuras 65, 66 e 67 apresentam os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 9.

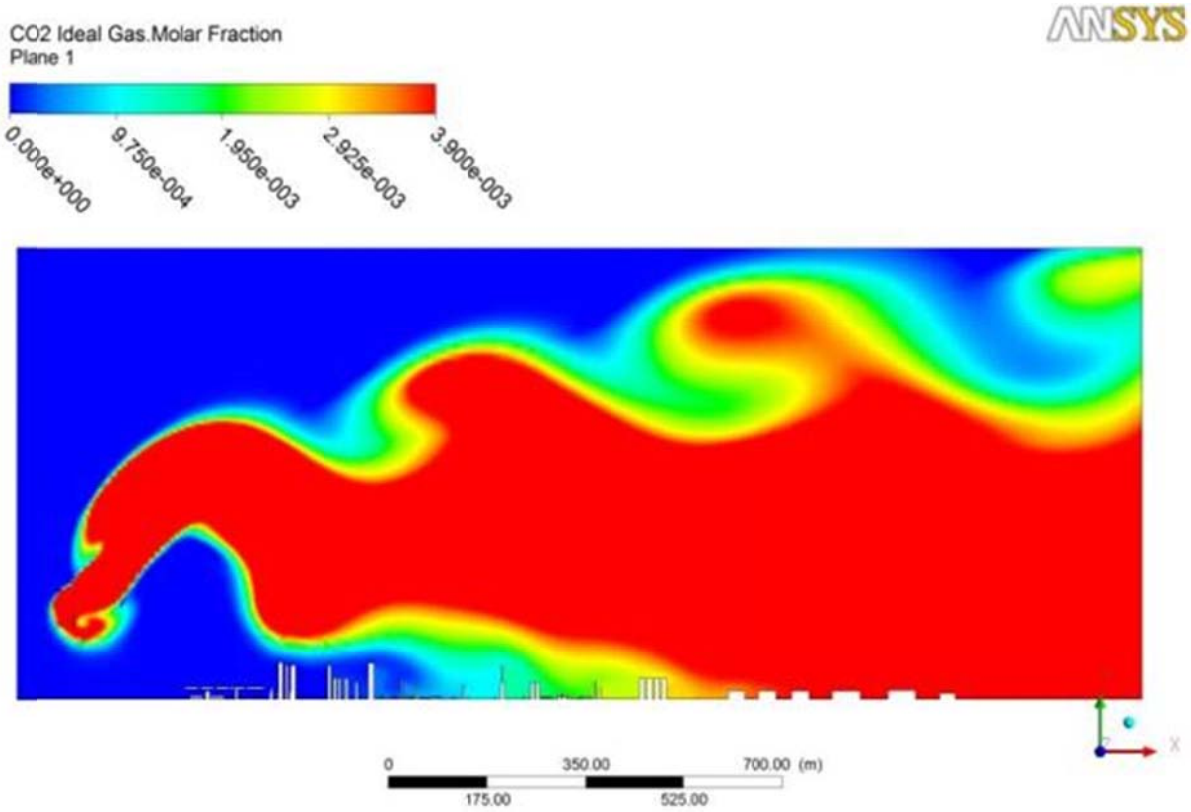


Figura 65: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 9.

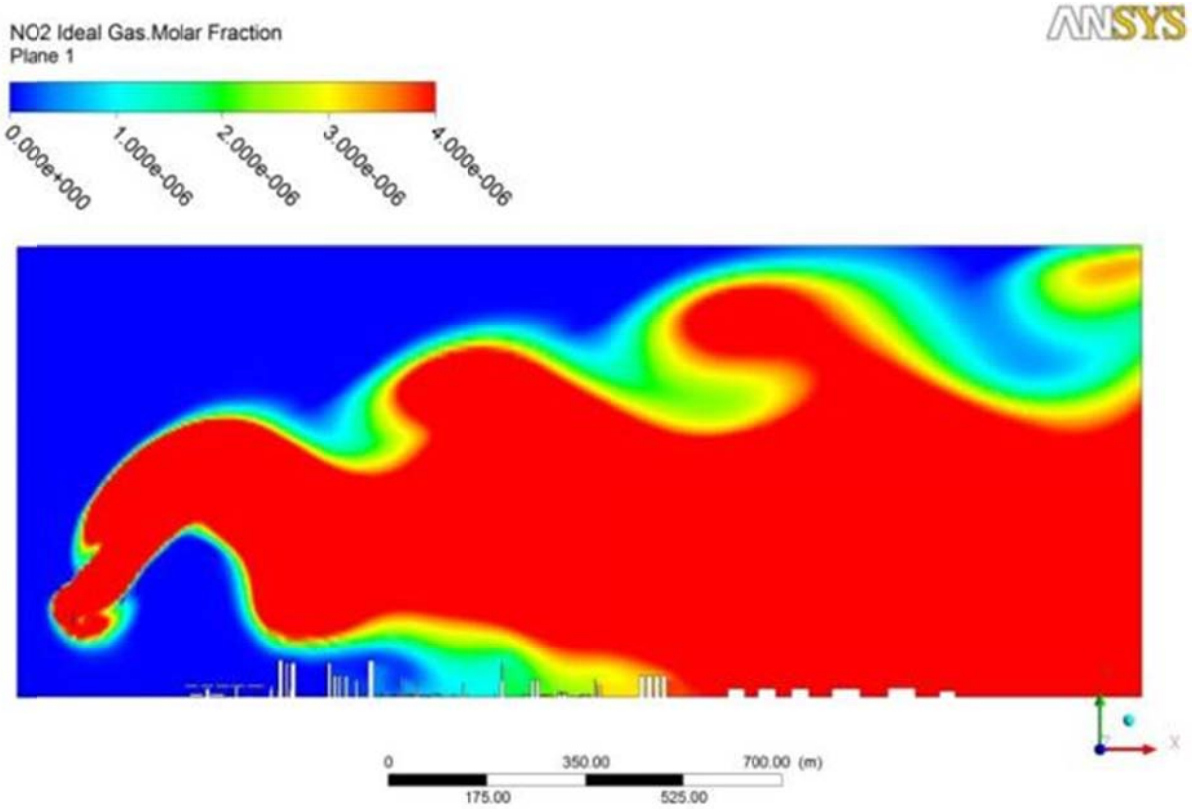


Figura 66: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 9.

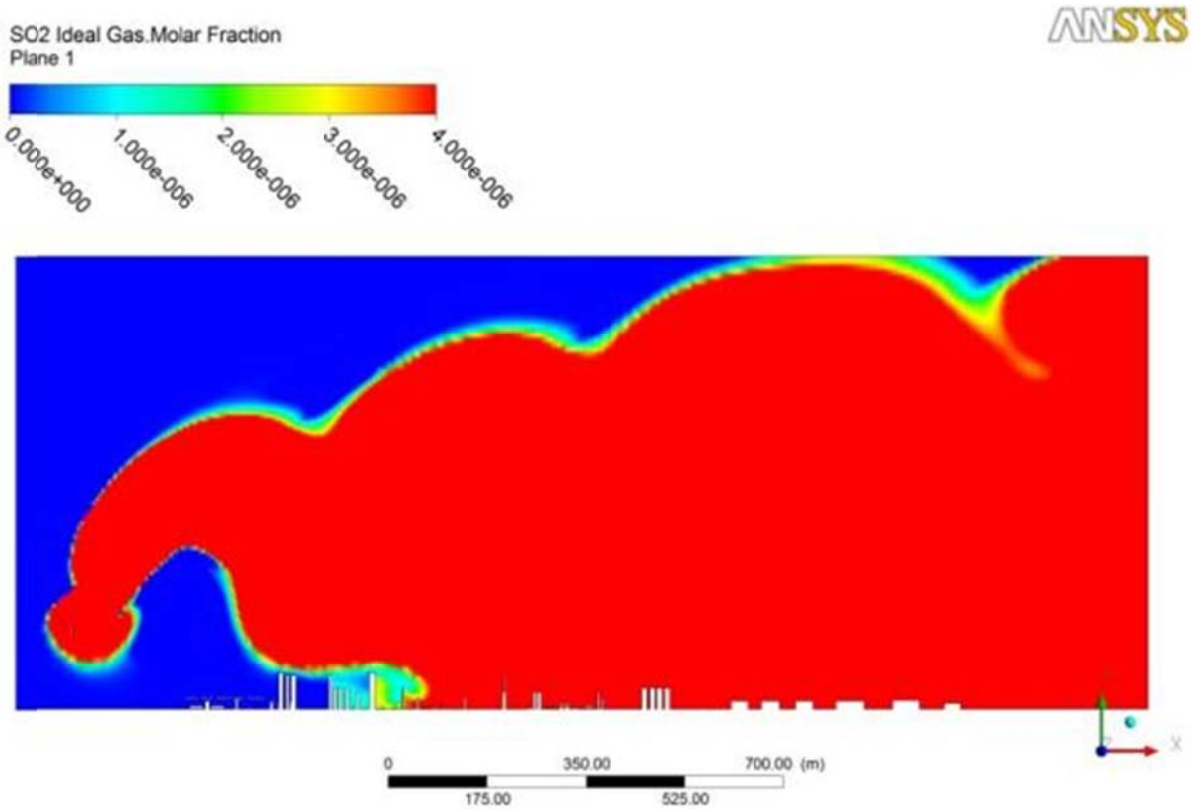


Figura 67: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 9.

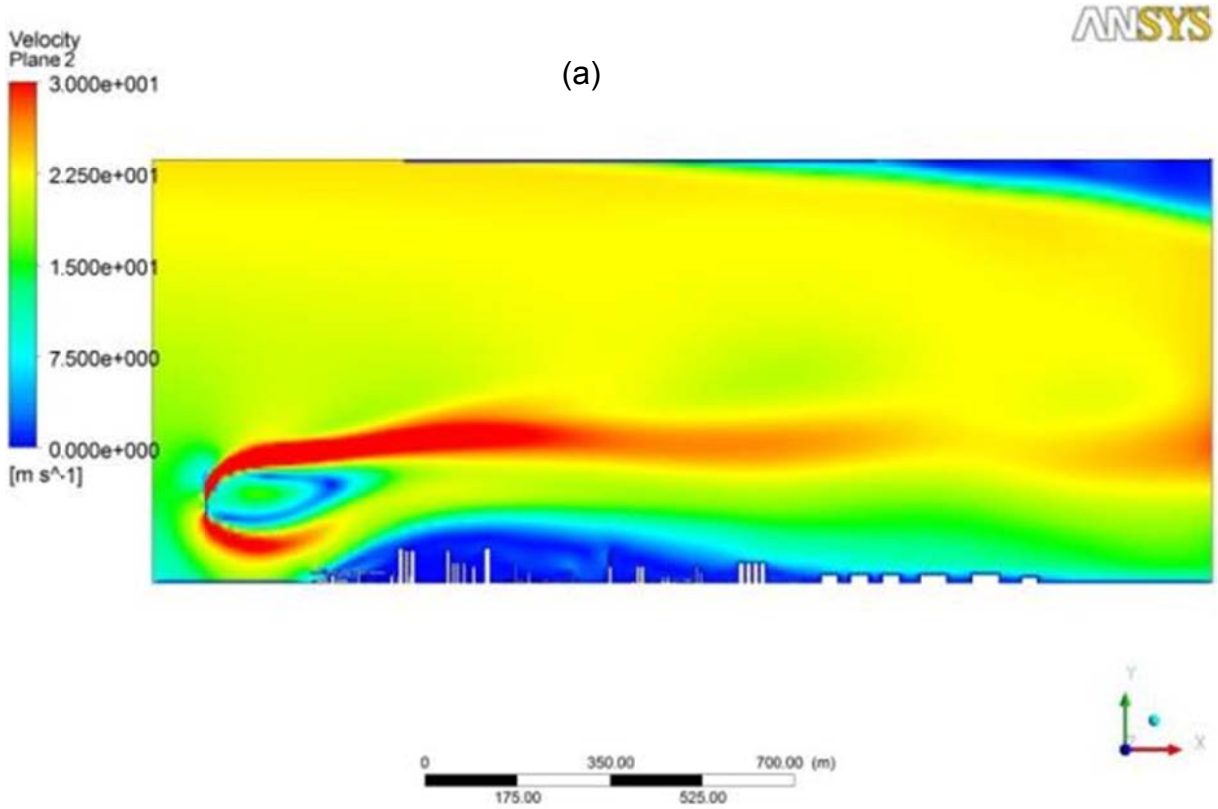
Os limites de tolerância no nível do solo são atingidos a aproximadamente 1,2km, 1,05km e 600m para CO_2, NO_2 e SO_2, respectivamente, de distância do *flare*.

Neste caso, ao contrário do que se esperava na Figura 12 para atmosfera estável, a pluma não apresentou perfil linear e estreito. Este comportamento pode ser explicado pela baixa velocidade do vento e alta vazão de emissão, fazendo com que houvesse maior turbulência, modificando o perfil esperado da pluma para atmosfera estável.

5.10 Caso 10

Este caso é semelhante ao Caso 9, com classe de estabilidade E (levemente estável) e vazão máxima de emissão (389 kg/s), variando-se apenas a velocidade do vento para 5 m/s a 10m de altura.

Com o aumento da velocidade do vento verifica-se que a interferência causada pelo *flare* - como obstáculo e através da emissão de gases em alta velocidade - limita-se a altitude menor que o caso anterior, entre 100 e 300m de altura (Figura 68).



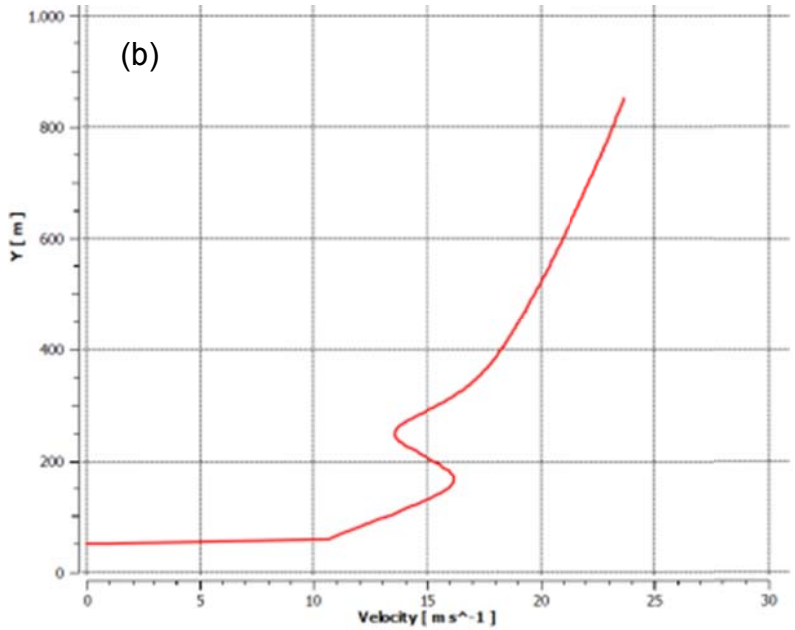


Figura 68: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a) e gráfico do perfil de velocidade na entrada (b) – Caso 10.

A seguir estão as Figuras 69, 70 e 71 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 10.

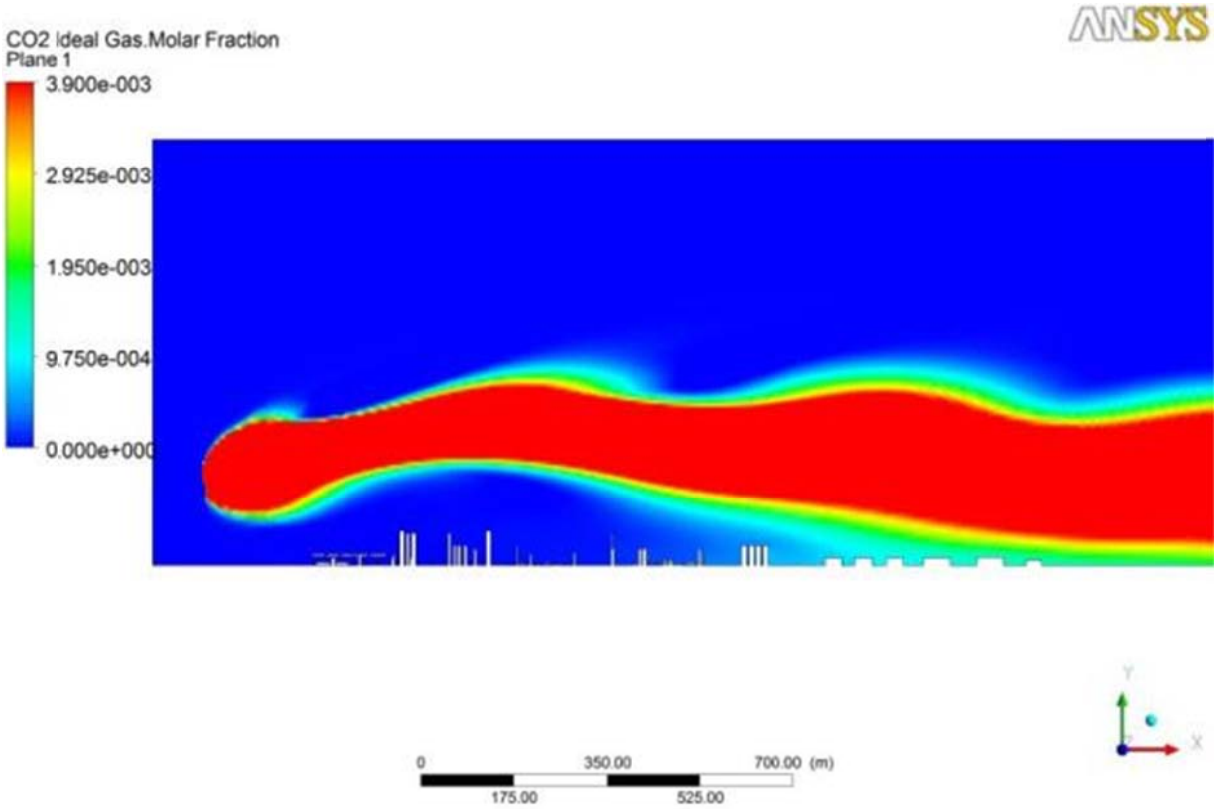


Figura 69: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 10.

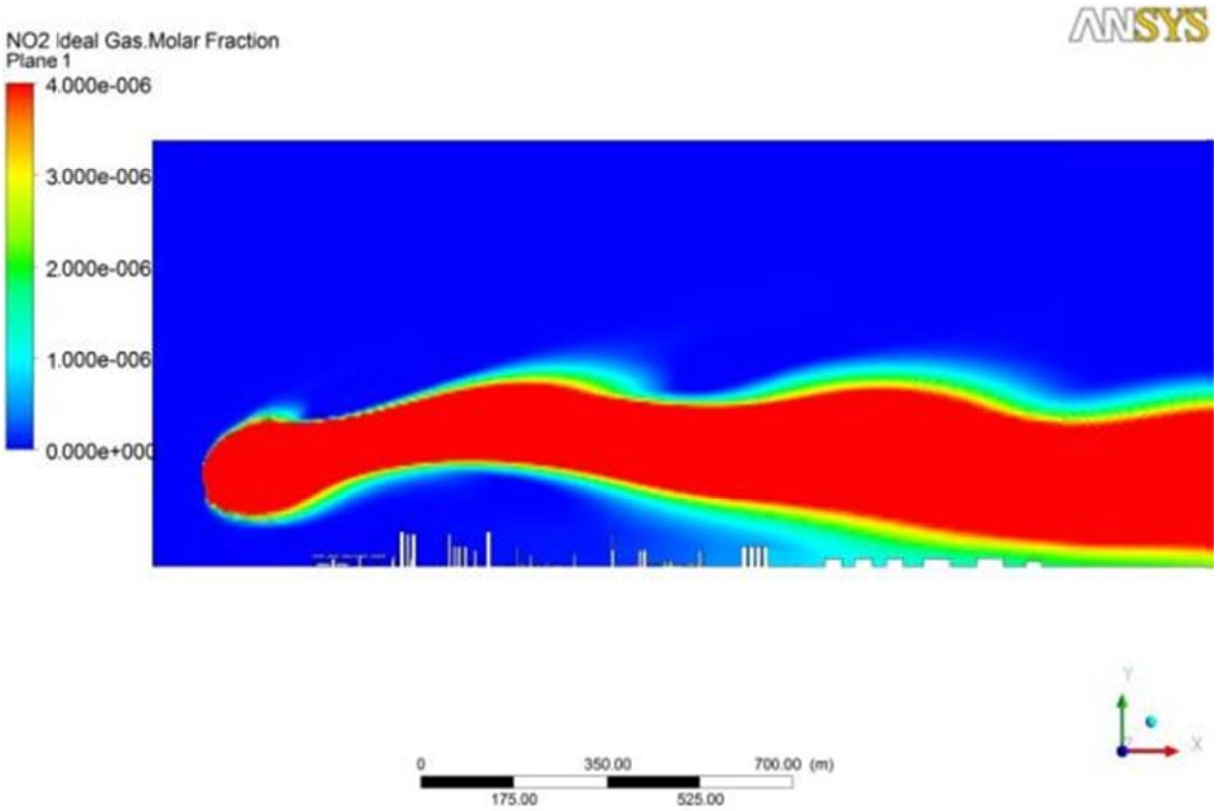


Figura 70: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 10.

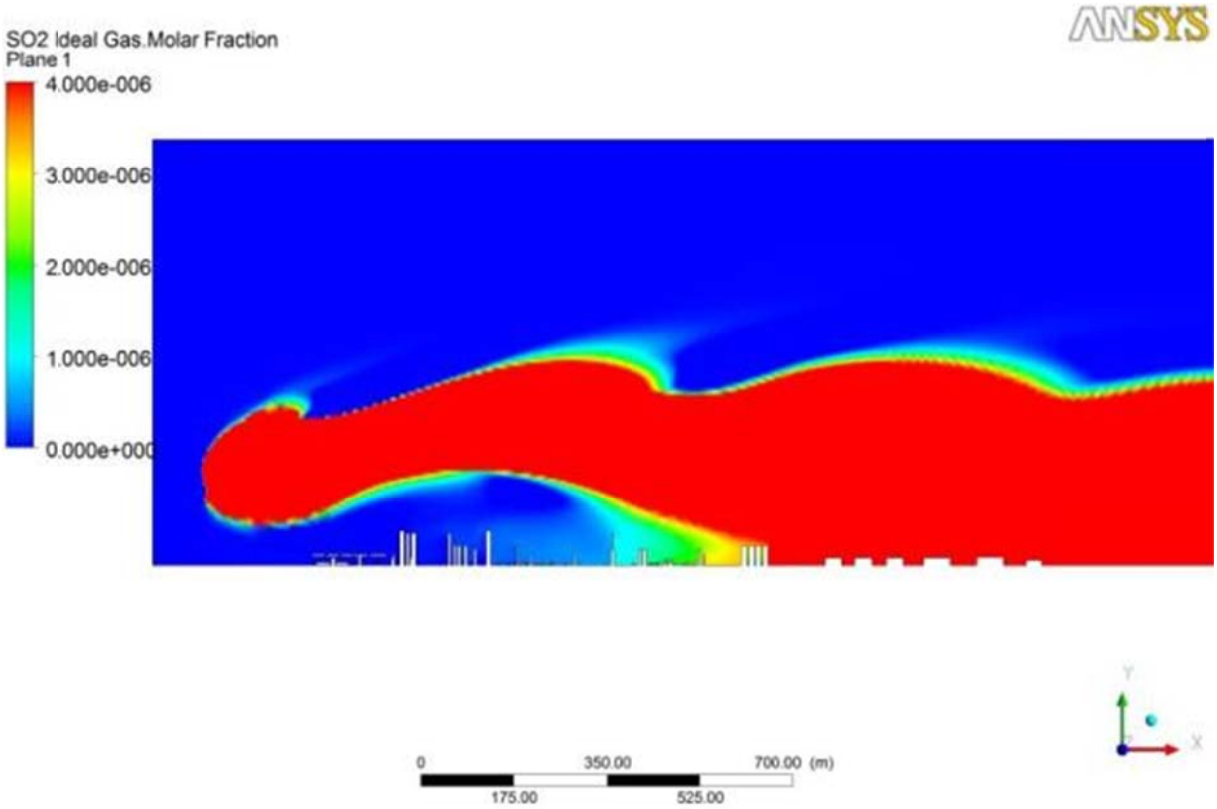


Figura 71: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 10.

Apenas para o SO_2 o limite de tolerância no nível do solo é atingido a aproximadamente 1km de distância do *flare*. Para CO_2 e NO_2 dentro do domínio adotado a pluma com os respectivos limites de tolerância não atinge o solo, porém, por apresentar tendência a descer, supõe-se que alcançará o solo a distâncias maiores. Além disso, para ambos compostos químicos os níveis de ação são atingidos próximo ao solo.

Para este caso a pluma apresentou perfil mais linear e estreito que o Caso 9, conforme esperado na Figura 12 para atmosfera levemente estável devido ao arraste horizontal promovido pelo vento em decorrência das suas altas velocidades em alturas elevadas. Verifica-se, portanto, a grande influência da velocidade do vento de referência sobre o formato da pluma em condições atmosféricas estáveis (ver Casos 9 e 10).

5.11 Caso 11

Neste caso estudou-se a classe de estabilidade F (estável), velocidade do vento 3 m/s a 10m de altura e vazão de contingência (389 kg/s). Verifica-se na Figura 72, assim como o exposto na Figura 28, que o vento apesar de apresentar baixa velocidade em baixas altitudes, atinge alta velocidade (34 m/s) em alturas elevadas. Isto faz com que a pluma assuma forma estreita e reta, assim como esperado na Figura 12 e evidenciado no Caso 10.

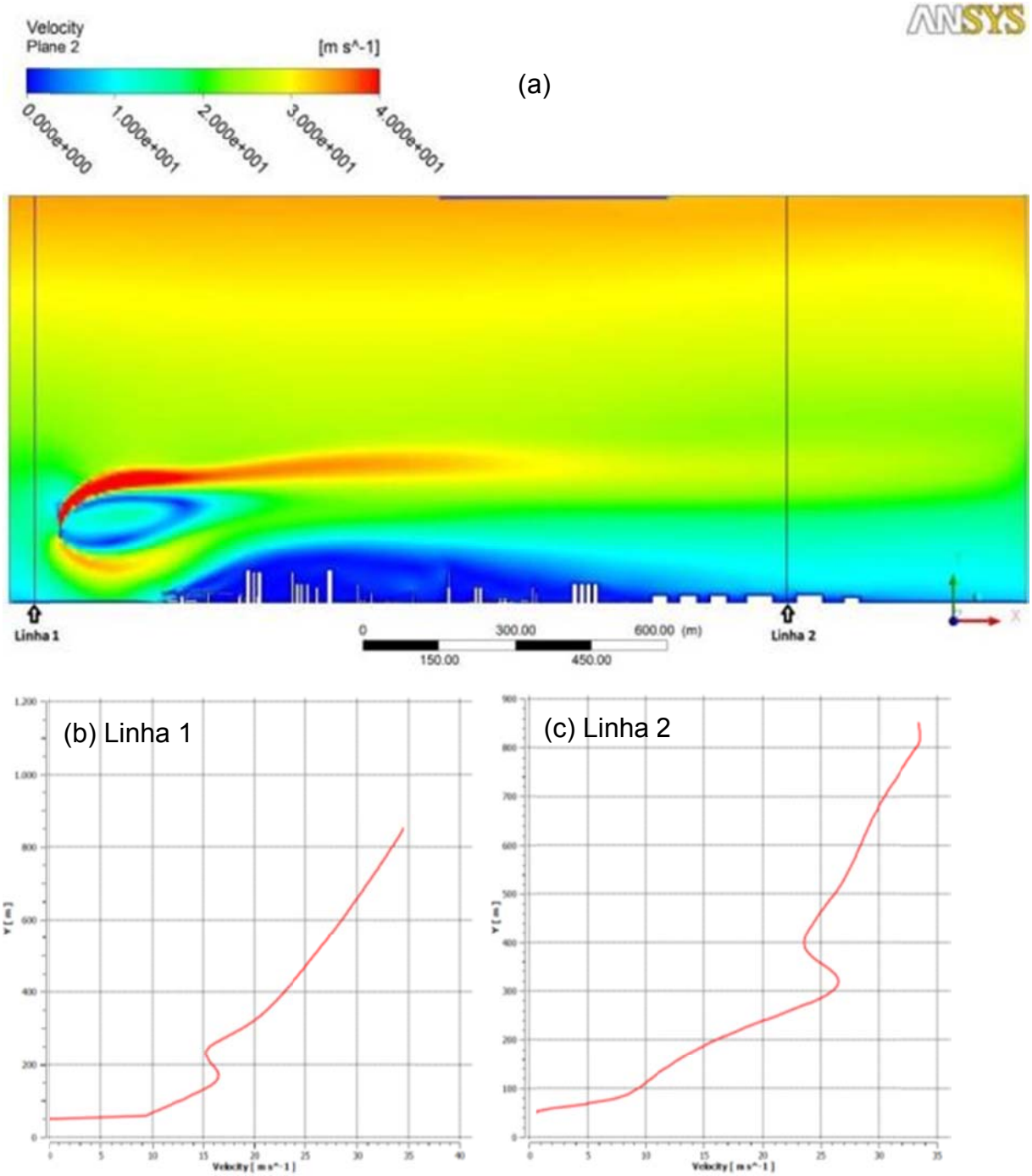


Figura 72: Perfil de velocidades ao longo do domínio (a), gráfico do perfil de velocidade na entrada (b) e gráfico do perfil de velocidade na saída (c) – Caso 11.

As Figuras 73, 74 e 75 apresentam os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 11.

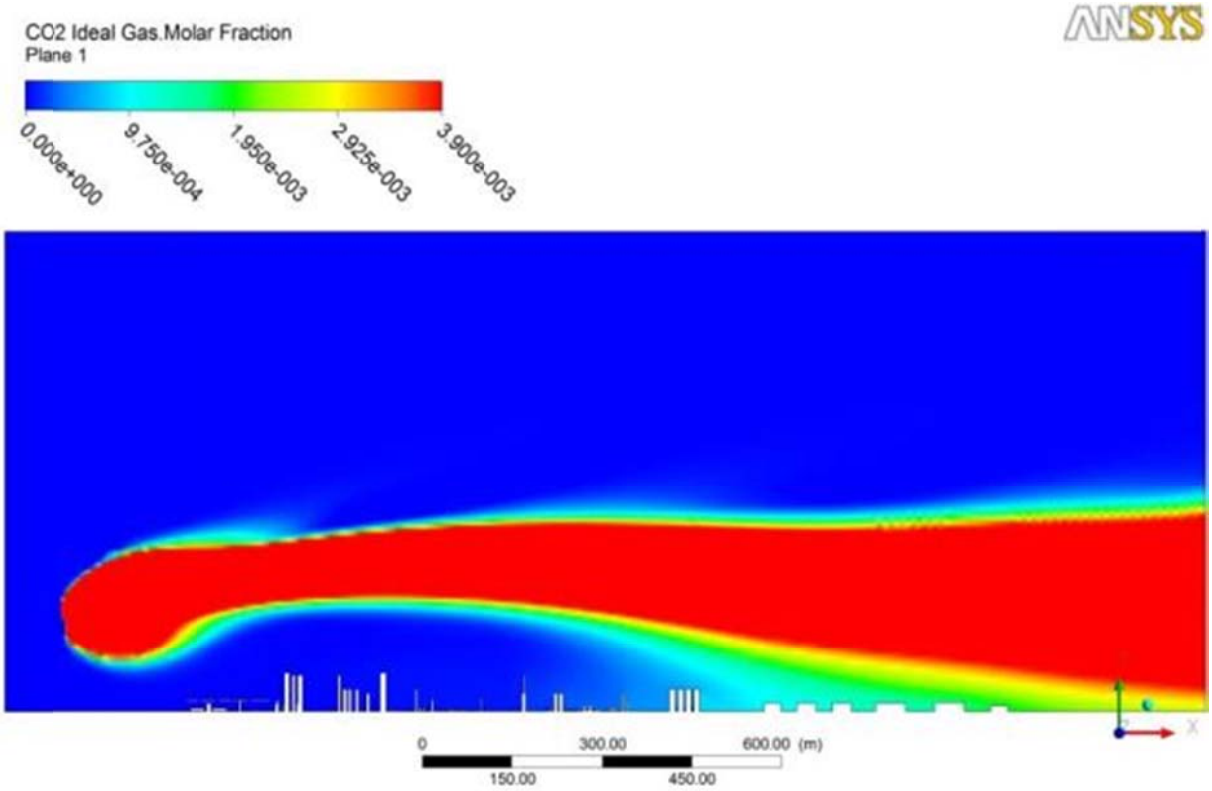


Figura 73: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 11.

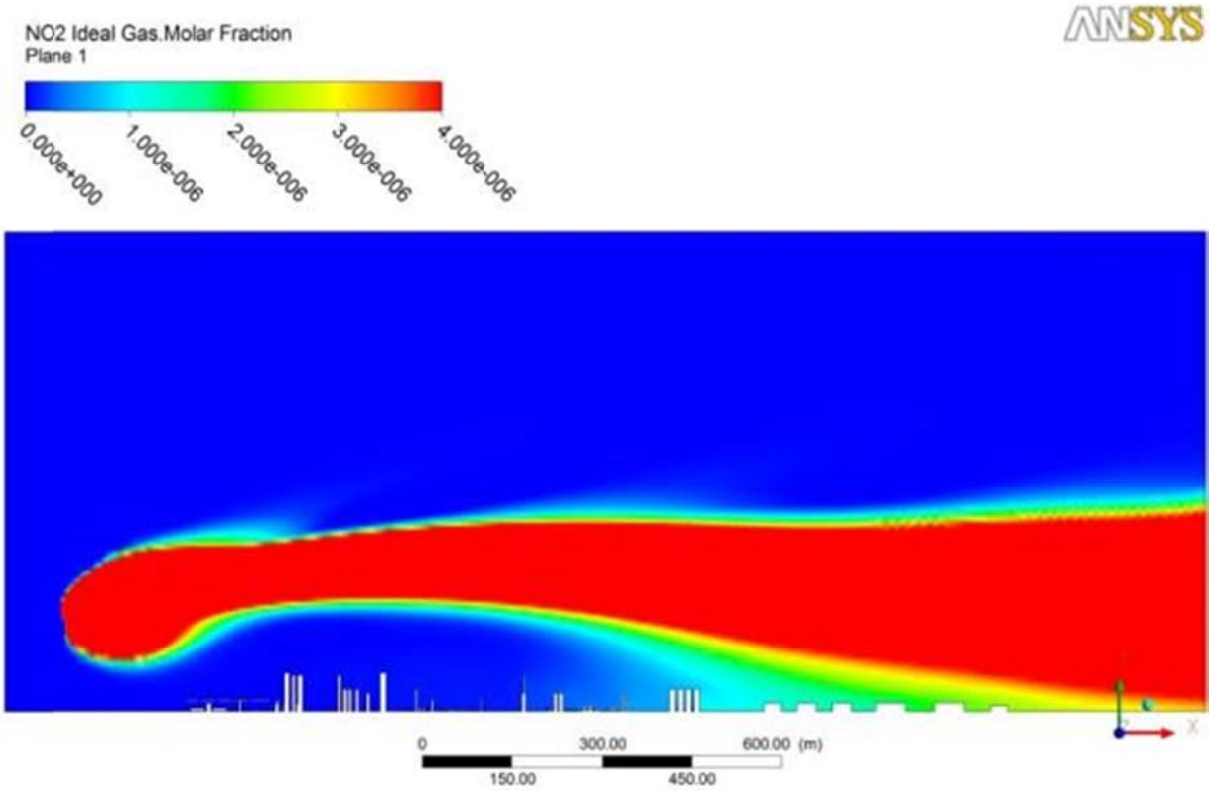


Figura 74: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 11.

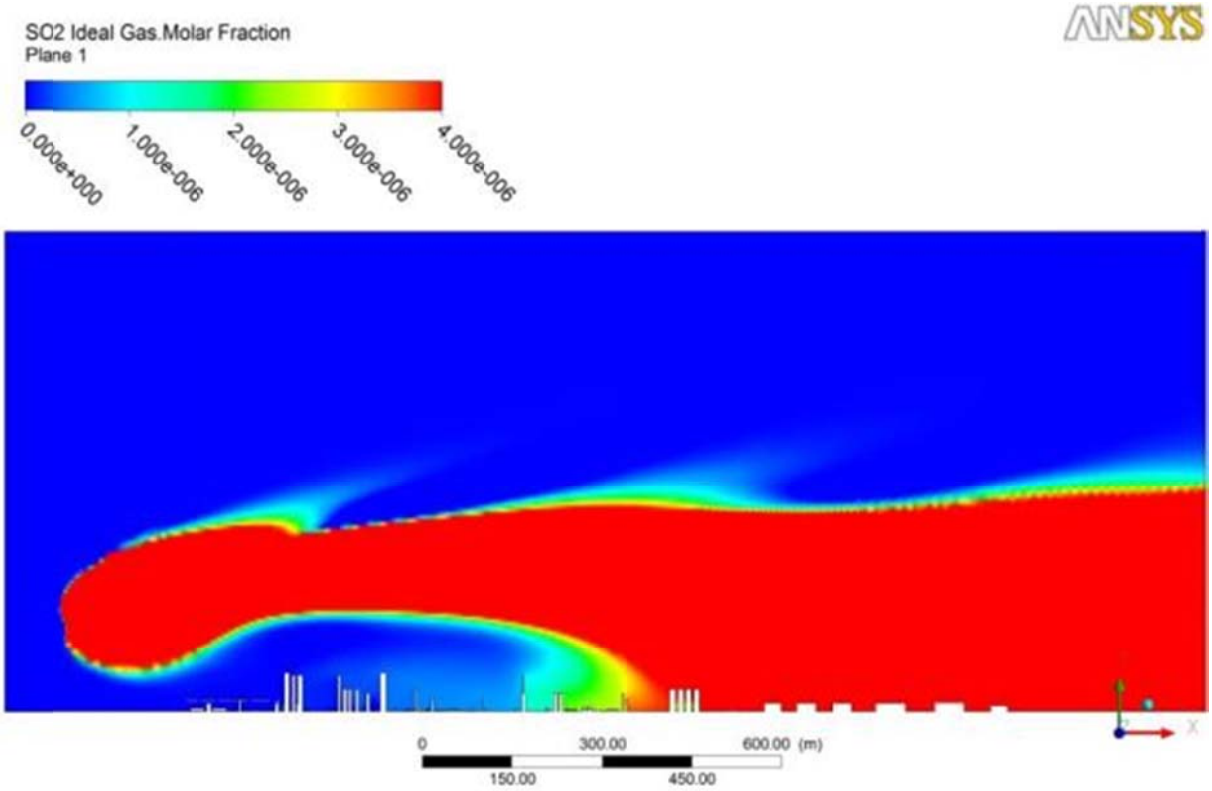


Figura 75: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 11.

Os limites de tolerância são atingidos para NO_2 e SO_2 a aproximadamente 1,8km e 1 km de distância do *flare*. Para o caso do CO_2 a pluma com os respectivos limites de tolerância quase atinge o solo no fim do domínio adotado, assim supõe-se que alcançará o solo a distâncias pouco maiores e verifica-se que o nível de ação é atingido.

5.12 Caso 12

Considerando a ocorrência de inversão térmica, representada por uma barreira no teto do domínio a 500m de altura, neste caso avalia-se o comportamento da pluma sob condição de estabilidade neutra (D) e velocidade do vento de 5 m/s a 10m de altura e em condições de operação do *flare* em caso de contingência (Ma = 0,5).

Nota-se, pelo sentido indicado nas setas de velocidade na Figura 76, que há turbulência no encontro da pluma com a camada de inversão e que após segue paralelamente ao topo do domínio.

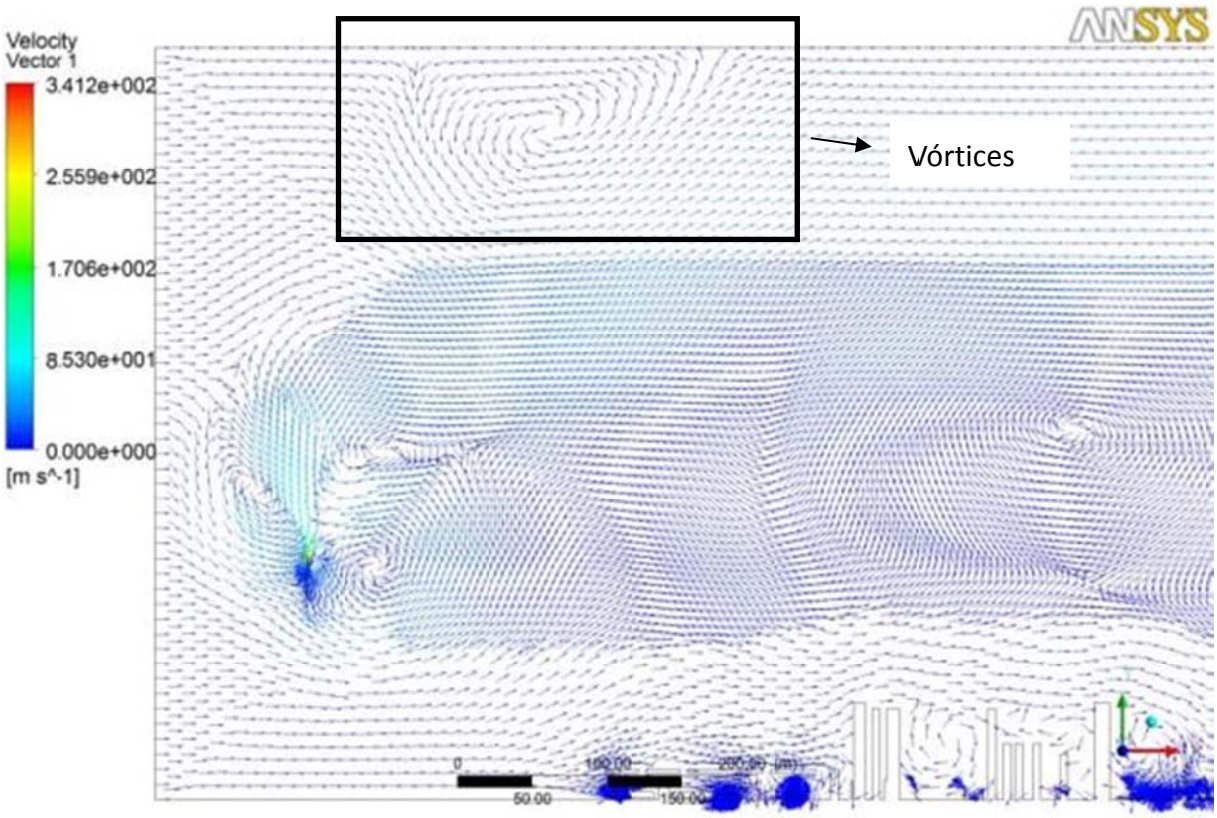


Figura 76: Perfil de velocidades do Caso 12.

A seguir estão as Figuras 77, 78 e 79 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 12.

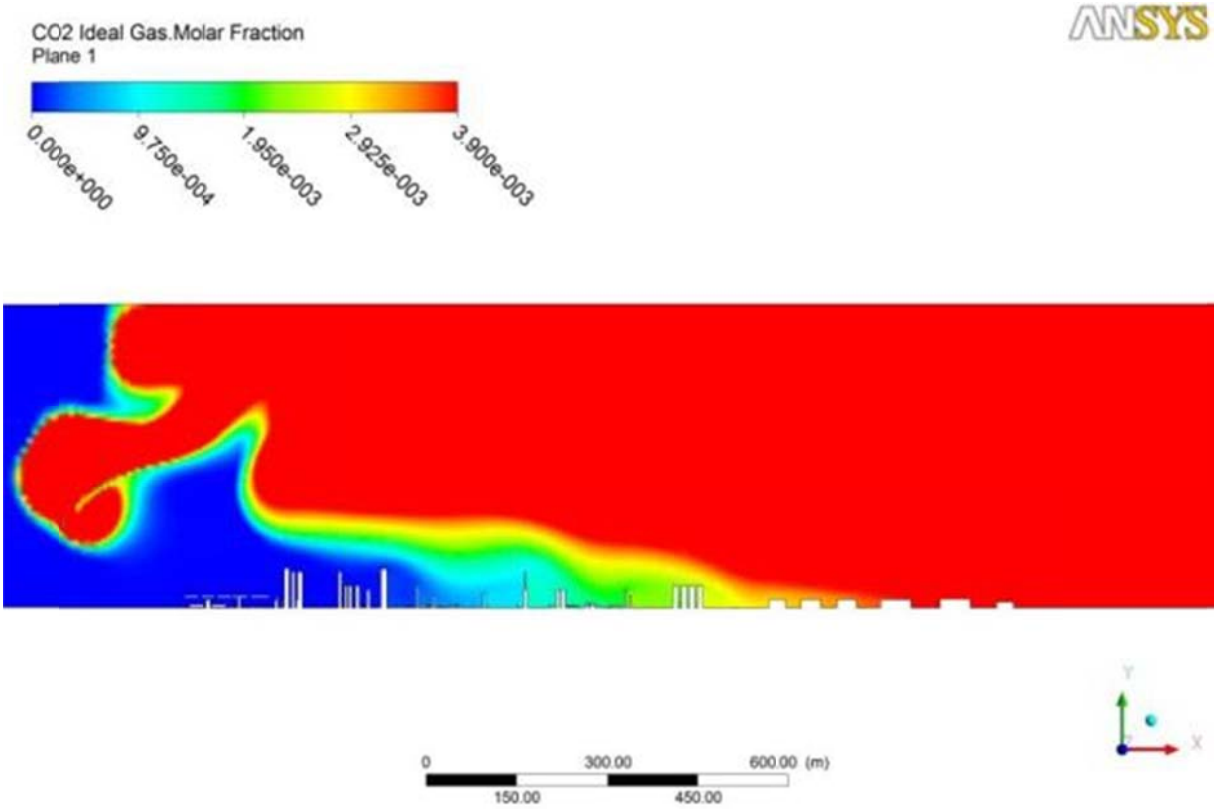


Figura 77: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 12.

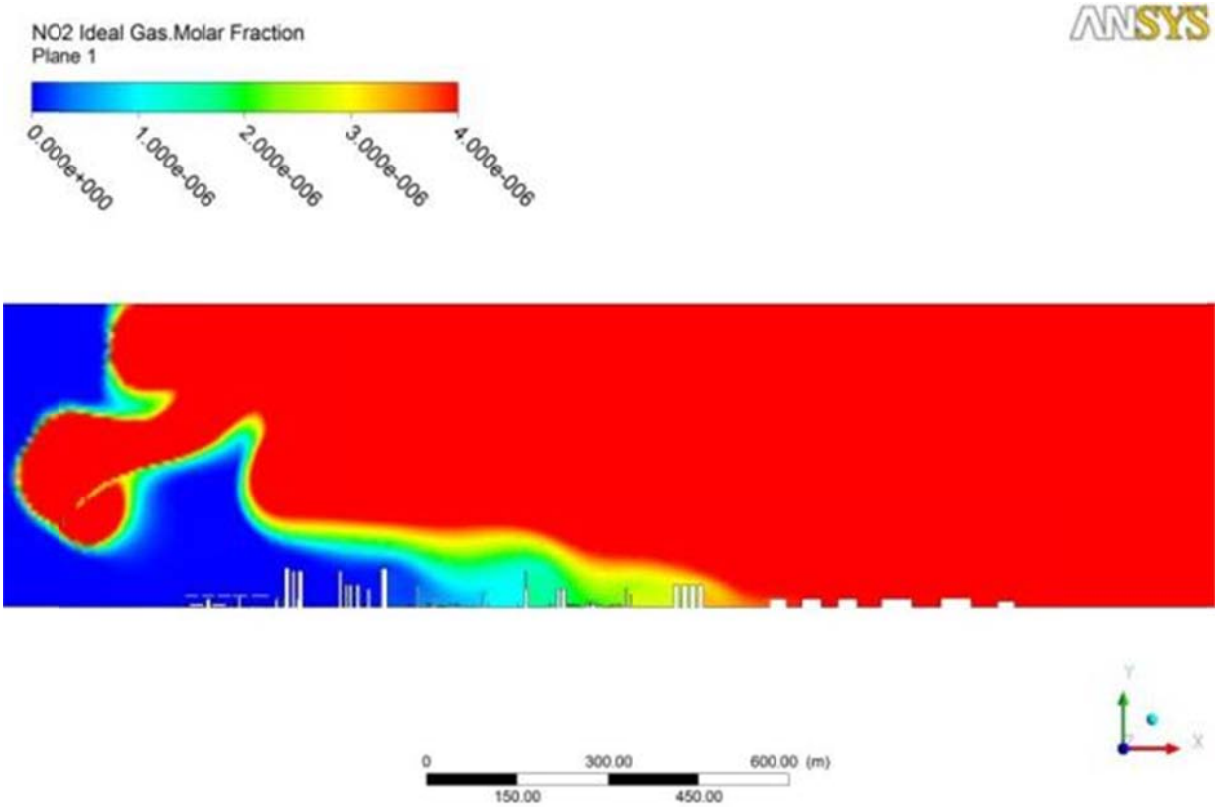


Figura 78: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 12.

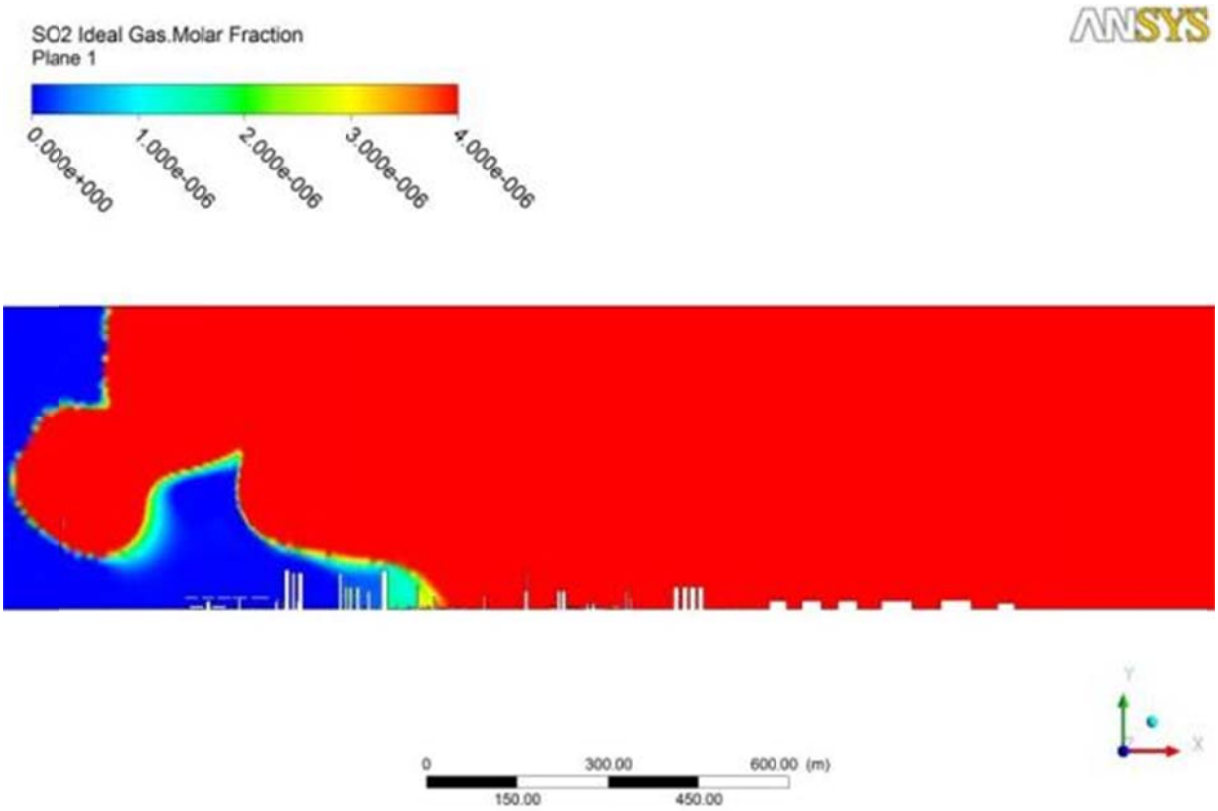


Figura 79: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 12.

Verifica-se que a pluma atinge a camada de inversão e acaba concentrando os poluentes próximo ao solo e em quase totalidade do domínio. Os limites de concentração são atingidos à distância de 1,1km, 1,3km e 600m do *flare* para NO_2, CO_2 e SO_2, respectivamente.

Em comparação com o Caso 7, onde foram mantidas todas as condições, exceto pela não ocorrência de inversão térmica, verifica-se que a presença da camada de inversão em condições de altas vazões de operação do *flare*, fez com que fossem afetadas as concentrações dos 3 principais poluentes ao nível do solo. Houve aumento das concentrações de poluentes em baixas altitudes. Desta forma, a ocorrência de inversão térmica em casos de contingência (Ma = 0,5) pode ser determinante para uma situação de risco à saúde humana tanto dentro como fora dos limites da refinaria.

5.13 Caso 13

Este caso também contempla a inversão térmica e vazão de 389 kg/s, porém com classe de estabilidade E (levemente estável) e a velocidade do vento 3 m/s a

10m de altura.

Verifica-se que com vento mais fraco e atmosfera estável, a pluma só alcança a camada de inversão a uma distância maior da tocha, no entanto, as concentrações limites no solo estão à mesma distância do *flare* que no Caso 12.

Em comparação com o Caso 9, onde foram mantidas as condições de classe de estabilidade, vento e vazão (condição de contingência), apenas considerando a ocorrência de inversão térmica, verifica-se que a presença da camada de inversão não impacta nas concentrações de poluentes ao nível do solo, visto que a estabilidade da atmosfera, mesmo no caso sem inversão, já promovia o movimento descendente da pluma devido às altas velocidades do vento em elevadas altitudes. Desta forma, verifica-se que mesmo em uma condição de atmosfera levemente estável os efeitos do vento sobre a pluma são impactantes.

A seguir estão as Figuras 80, 81 e 82 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 13.

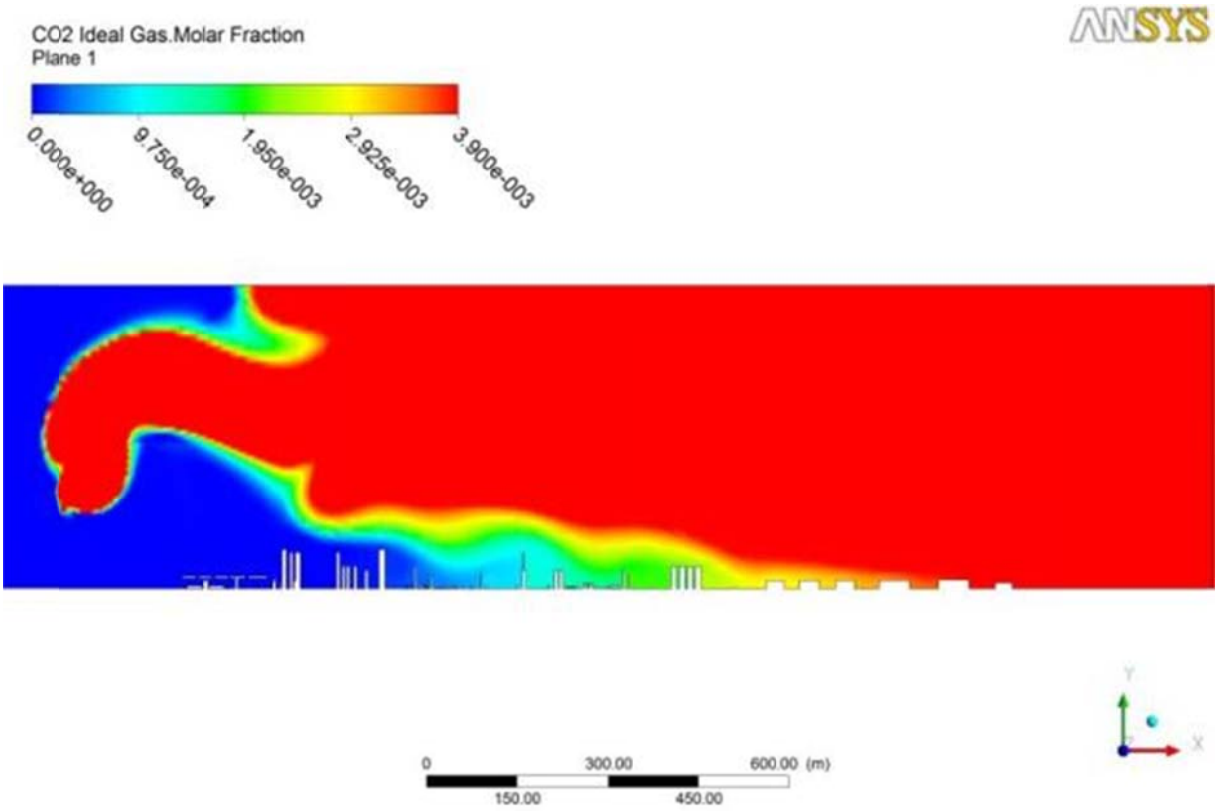


Figura 80: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 13.

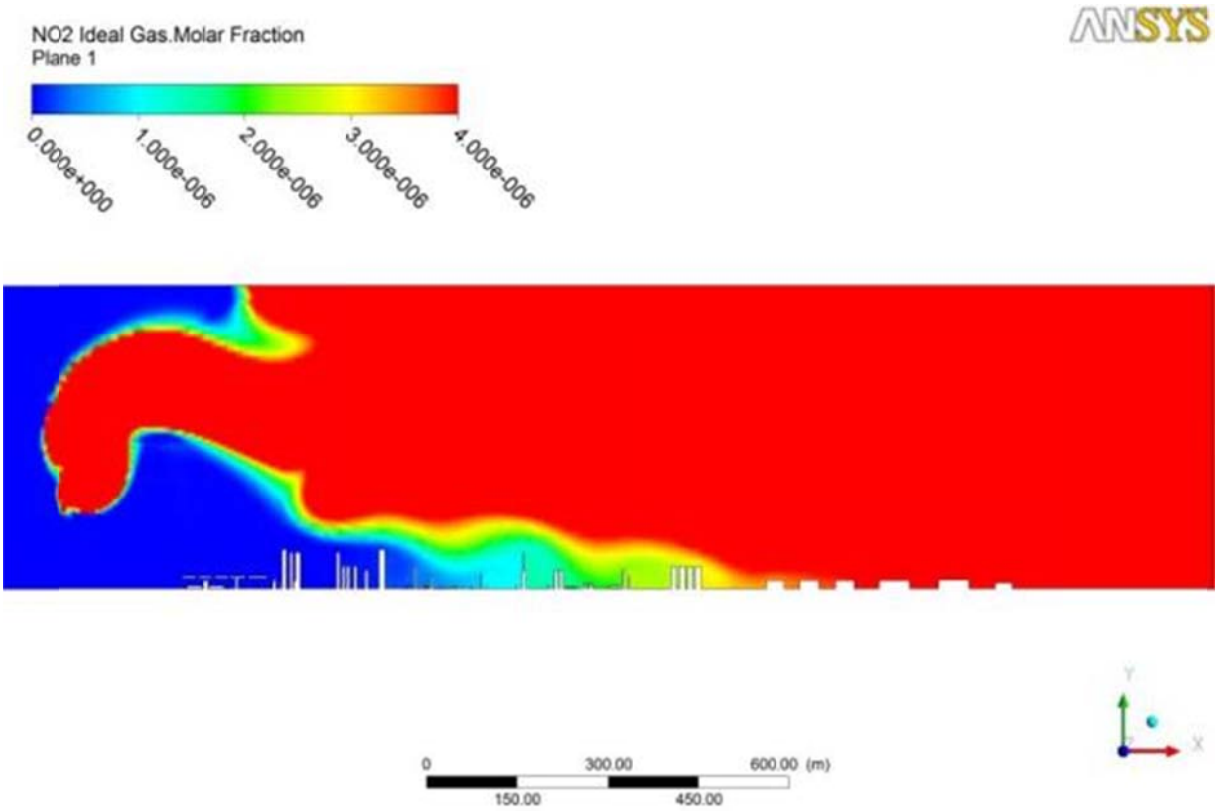


Figura 81: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 13.

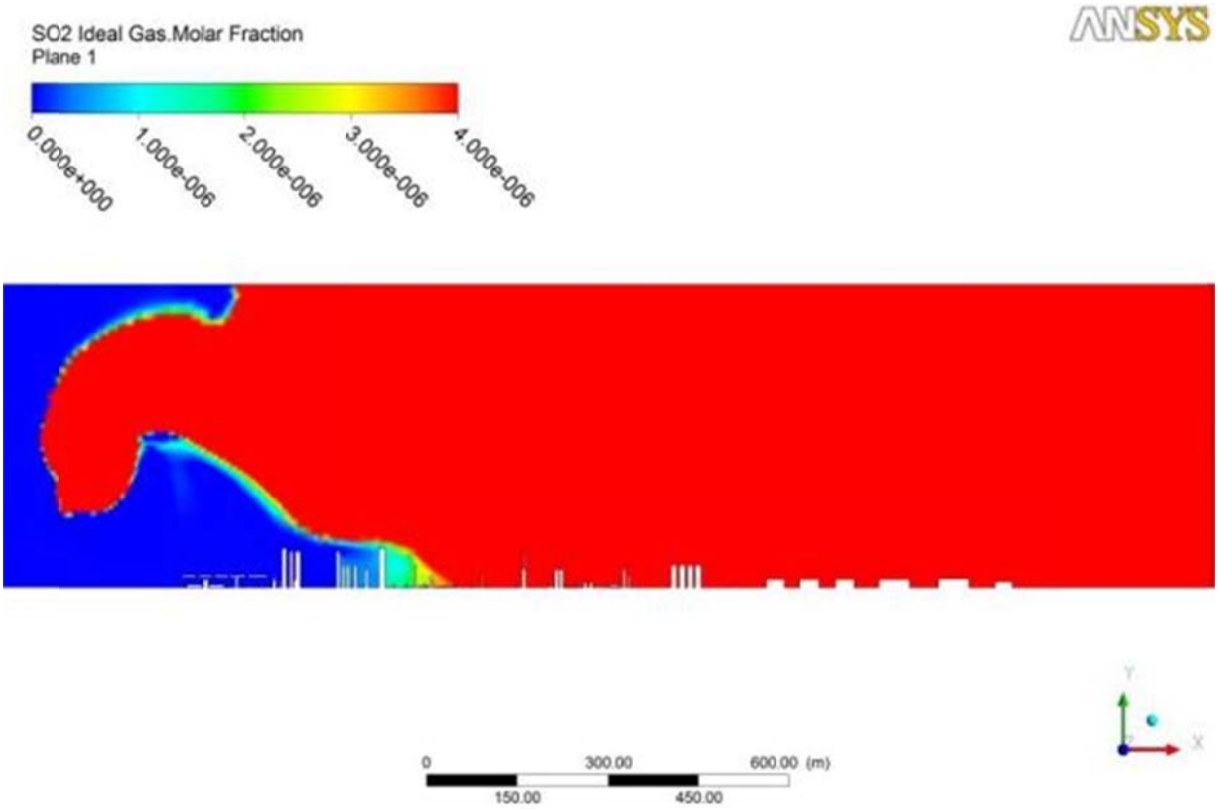


Figura 82: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 13.

5.14 Caso 14

Este caso é semelhante ao Caso 13, com inversão térmica, vazão de contingência e classe de estabilidade E, apenas aumentando a velocidade do vento para 5 m/s a 10m de altura.

Conforme verificado no Caso 13, há prevalência dos efeitos do vento sobre a trajetória descendente da pluma em relação aos efeitos da inversão térmica quando a atmosfera apresenta certo grau de estabilidade. Assim sendo, no Caso 14 estes efeitos são ainda mais relevantes do que no caso anterior, visto que a velocidade na altura de referência é maior (5 m/s). Verifica-se que o vento moderado é capaz de arrastar a pluma, que não alcança a camada de inversão, e os limites de tolerância são encontrados a distâncias mais próximas do *flare*, a 600m para SO_2, 1,6km para NO_2 e 1,9km para CO_2.

Por estes motivos não se verifica alteração relevante nos níveis de concentração dos poluentes em comparação ao Caso 10, onde foram mantidas as condições atmosféricas e de vazão, porém não considerando inversão térmica.

A seguir estão as Figuras 83, 84 e 85 dos perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 14.

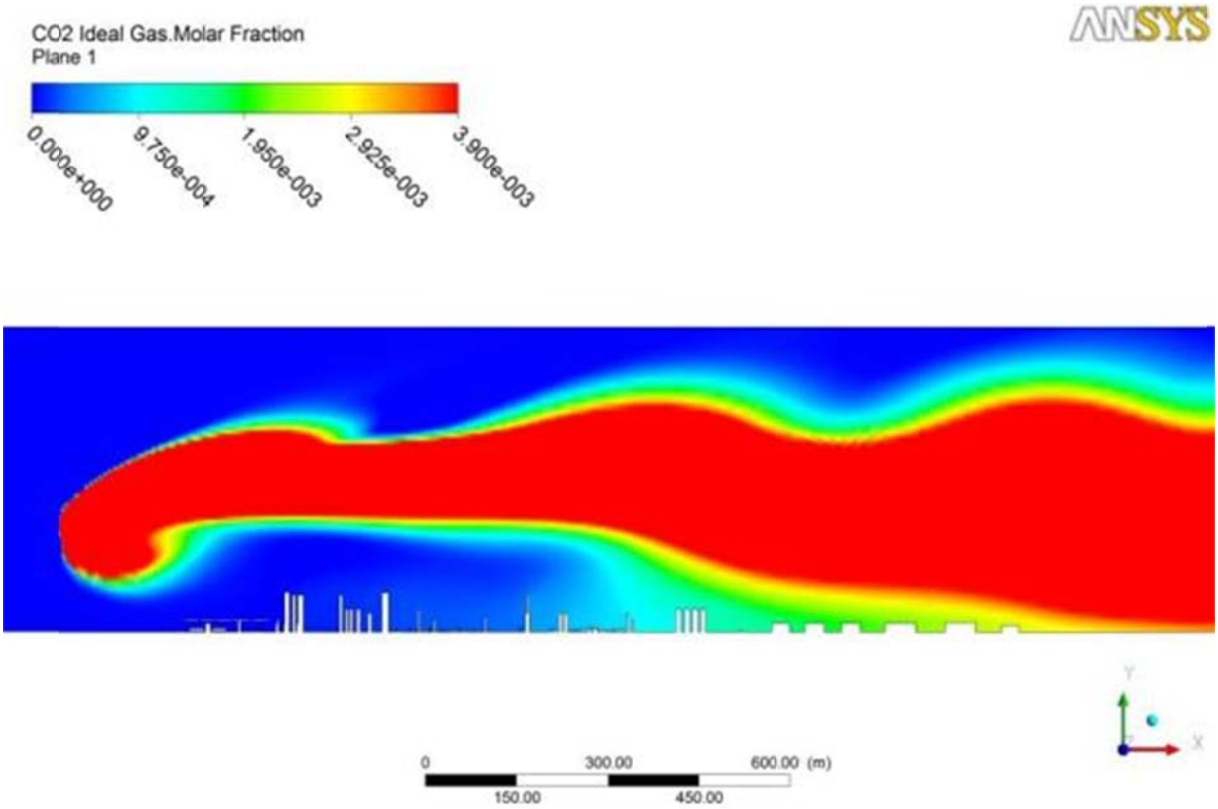


Figura 83: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 14.

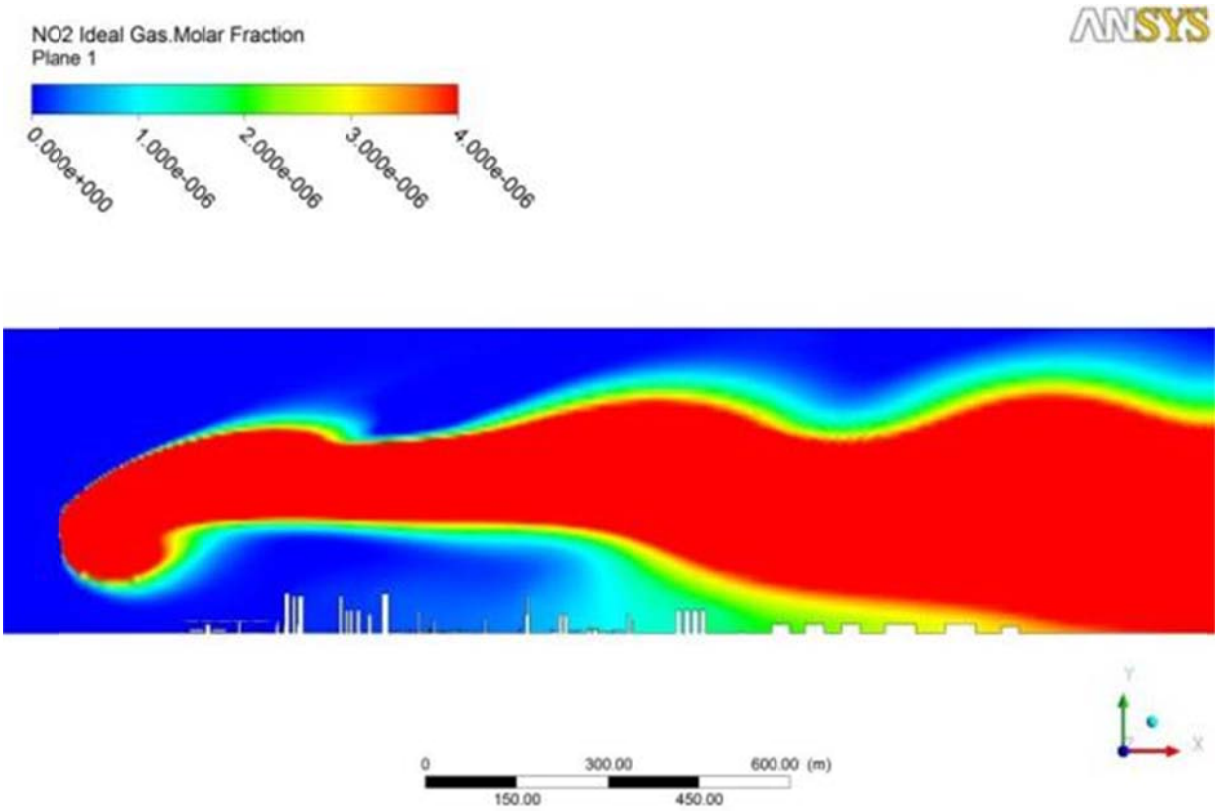


Figura 84: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 14.

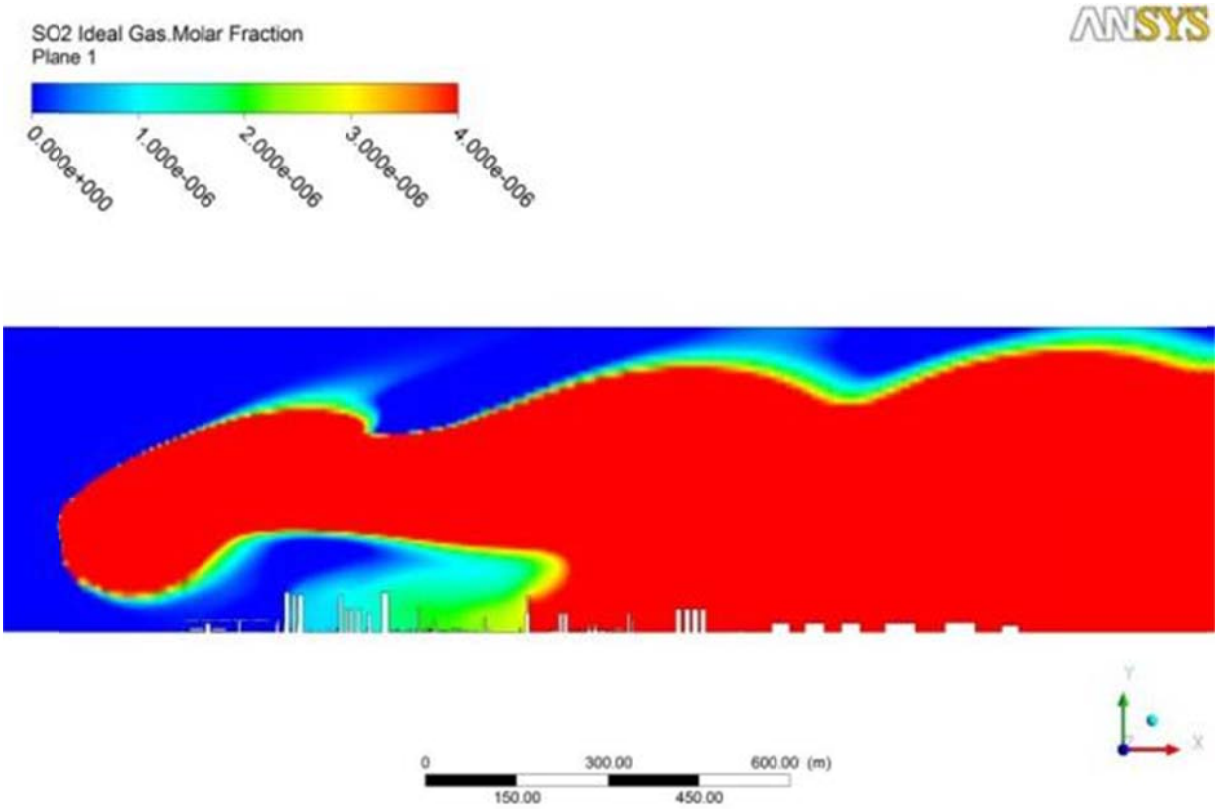


Figura 85: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 14.

5.15 Caso 15

Para este caso estudou-se a classe de estabilidade F (estável), velocidade do vento 3 m/s a 10m de altura, vazão máxima de projeto e ocorrência de inversão térmica. Conforme previsto na Figura 28, esta classe de estabilidade apresenta alta velocidade a elevadas altitudes e, dessa forma, o vento arrasta a pluma tornando-a estreita e baixa. Neste caso a pluma não atingiu a camada de inversão.

Nota-se uma pluma semelhante ao Caso 11, porém os limites de tolerância são encontrados a distâncias mais próximas do *flare*, 1,6 km para CO_2, 1,4 km para NO_2 e 750 m para o SO_2. Este último apresentando focos de concentração acima de 4 ppm para distâncias menores, provavelmente devido a vórtices encontrados entre os equipamentos.

Em comparação ao Caso 12, onde foi variada a classe de estabilidade (classe D), verifica-se que quando a atmosfera é mais estável há menor probabilidade da pluma alcançar a camada de inversão fazendo com que haja menores concentrações de poluentes ao longo de maiores distâncias da fonte de emissão quando comparada à atmosfera neutra.

A seguir estão as Figuras 86, 87 e 88 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 15.

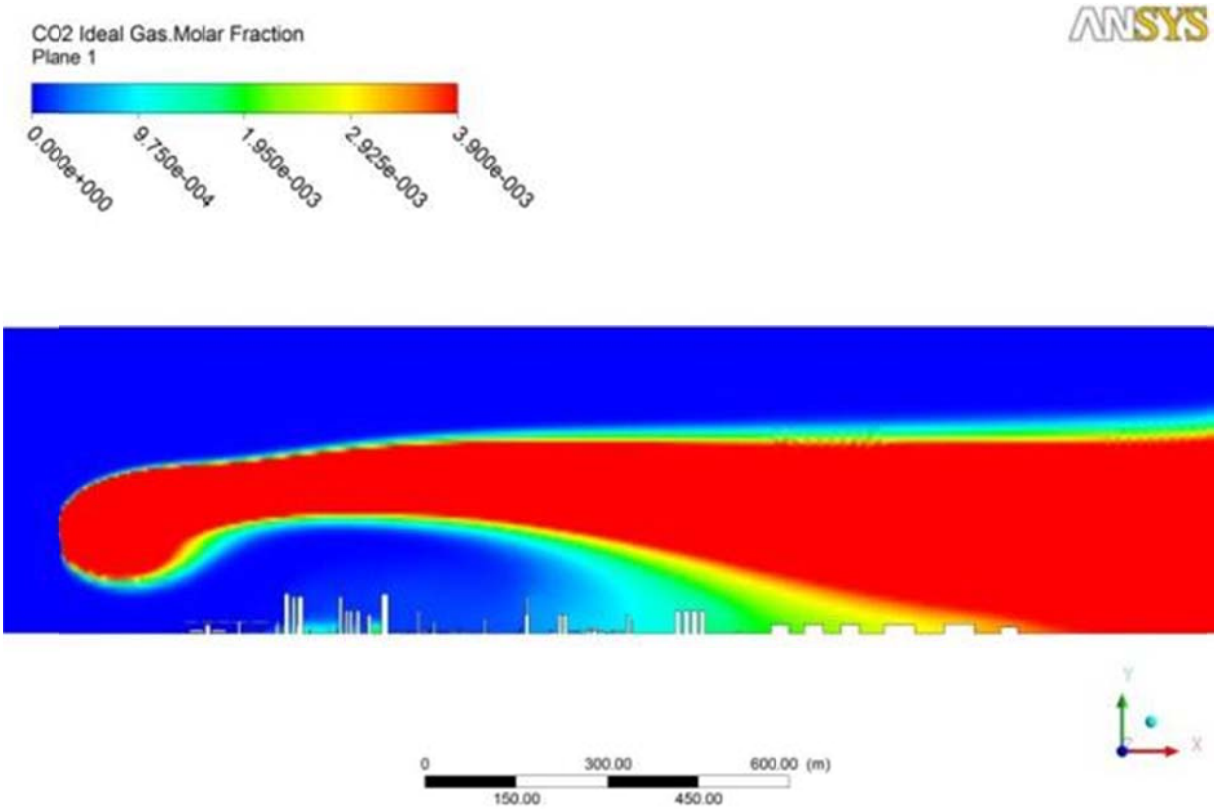


Figura 86: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 15.

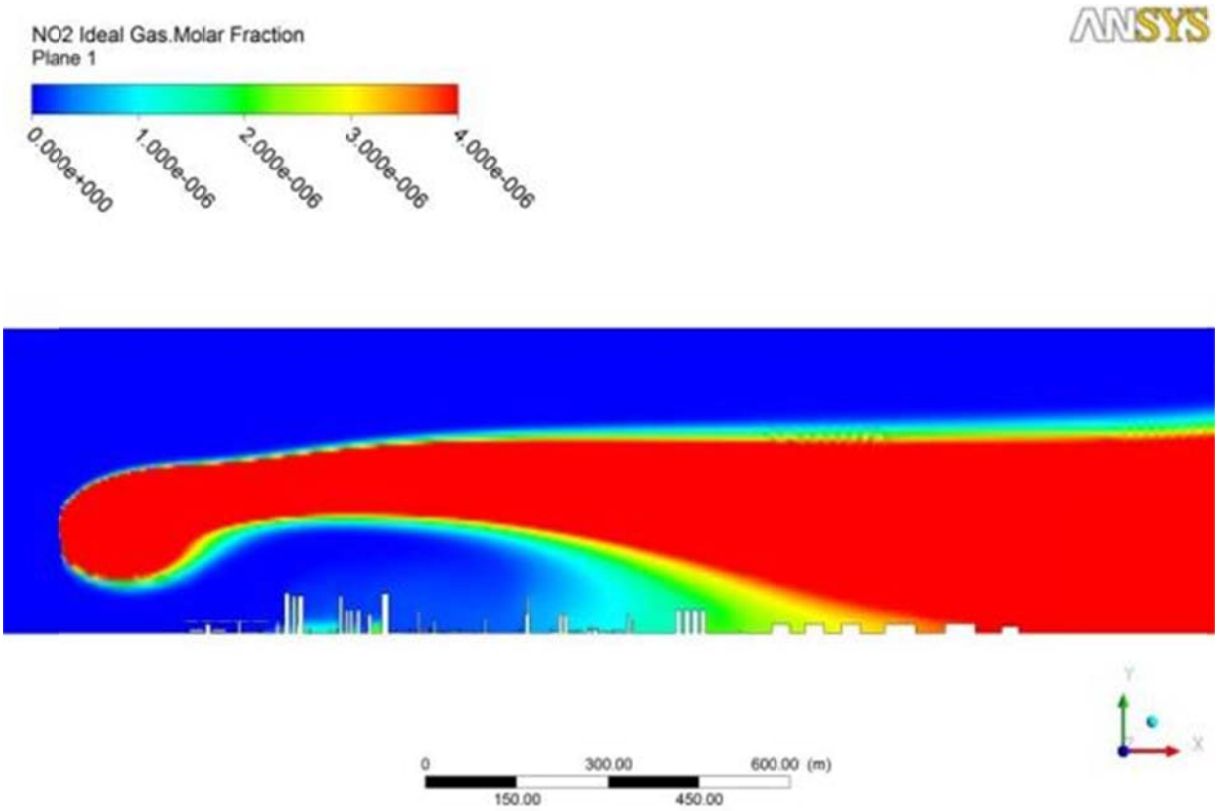


Figura 87: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 15.

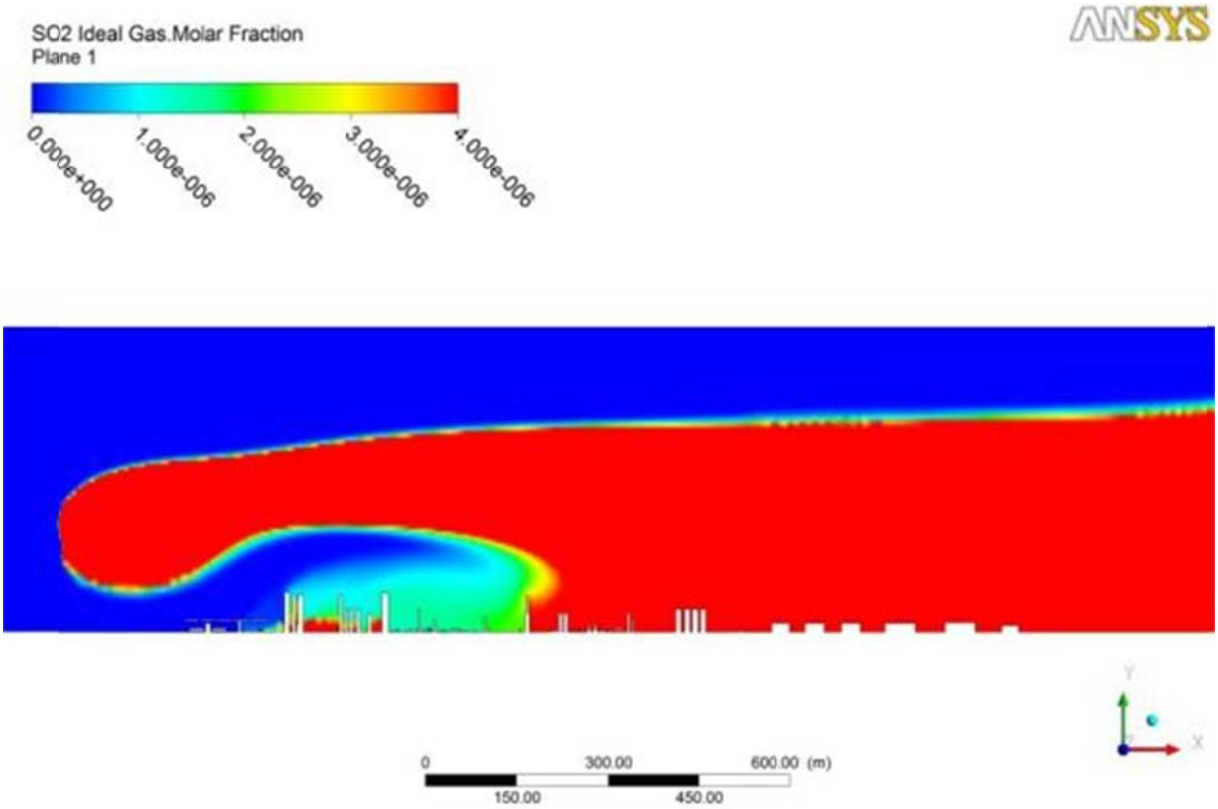


Figura 88: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 15.

5.16 Caso 16

O Caso 16 é equivalente ao Caso 2, com classe de estabilidade atmosférica A/B e vento de 3 m/s a 10 m de altura, variando-se apenas a vazão dos gases emitidos para 156 kg/s (Ma=0,2 ; condição normal de operação) e sem a ocorrência de inversão térmica.

Nota-se grande semelhança entre os perfis das plumas desses casos, com pequena variação na inclinação da pluma devido à menor vazão e consequente redução da velocidade de emissão dos gases. O Caso 16 por apresentar menor diferença entre a velocidade de emissão e a do vento tem a pluma levemente mais inclinada, devido ao arraste do vento, que a do Caso 2.

A seguir estão as Figuras 89, 90 e 91 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 16.

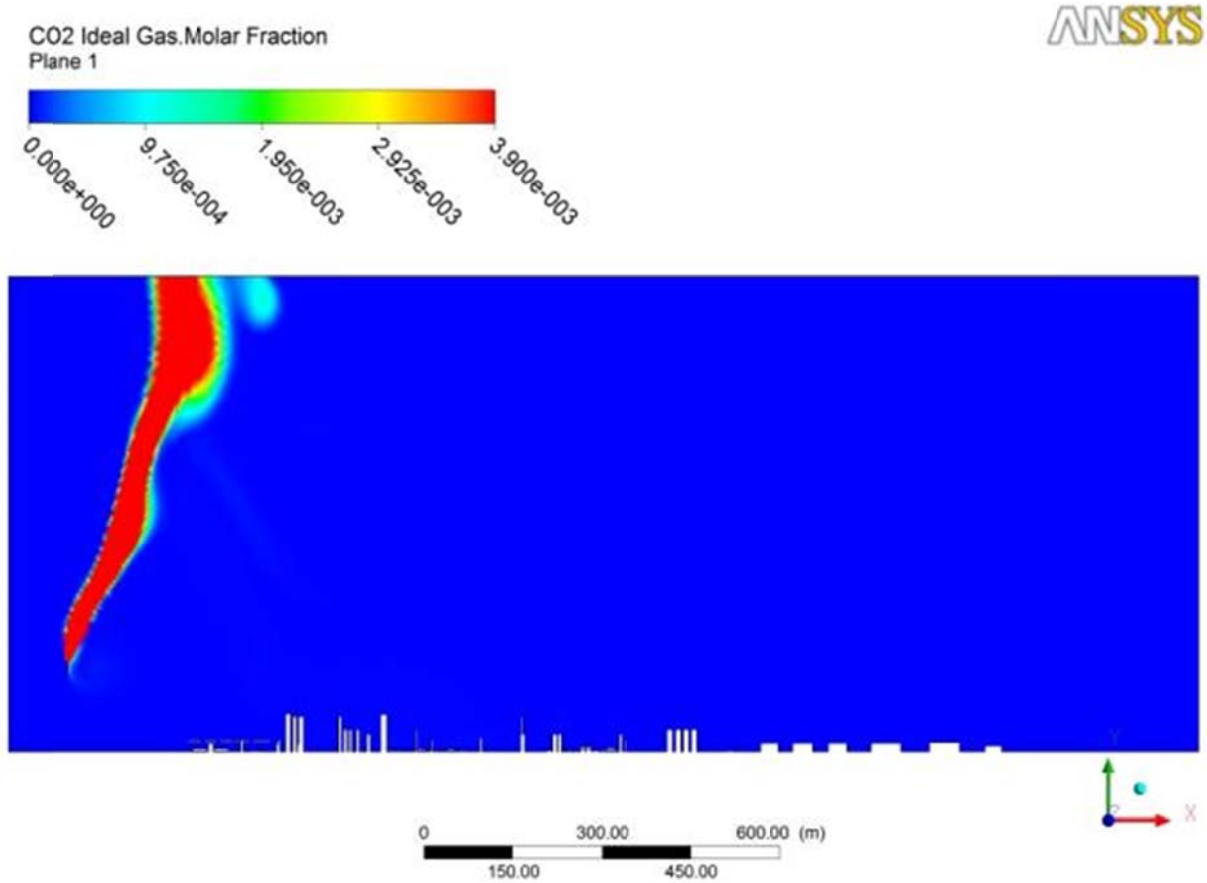


Figura 89: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 16.

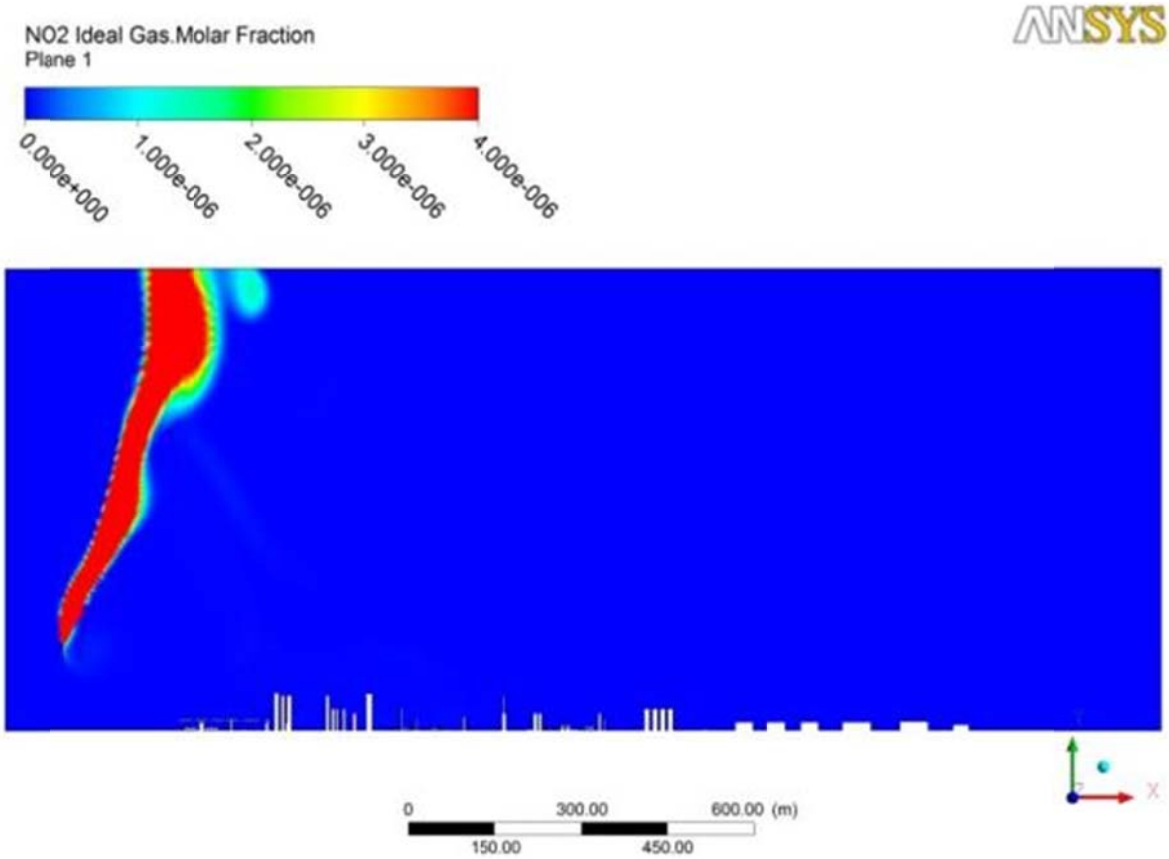


Figura 90: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 16.

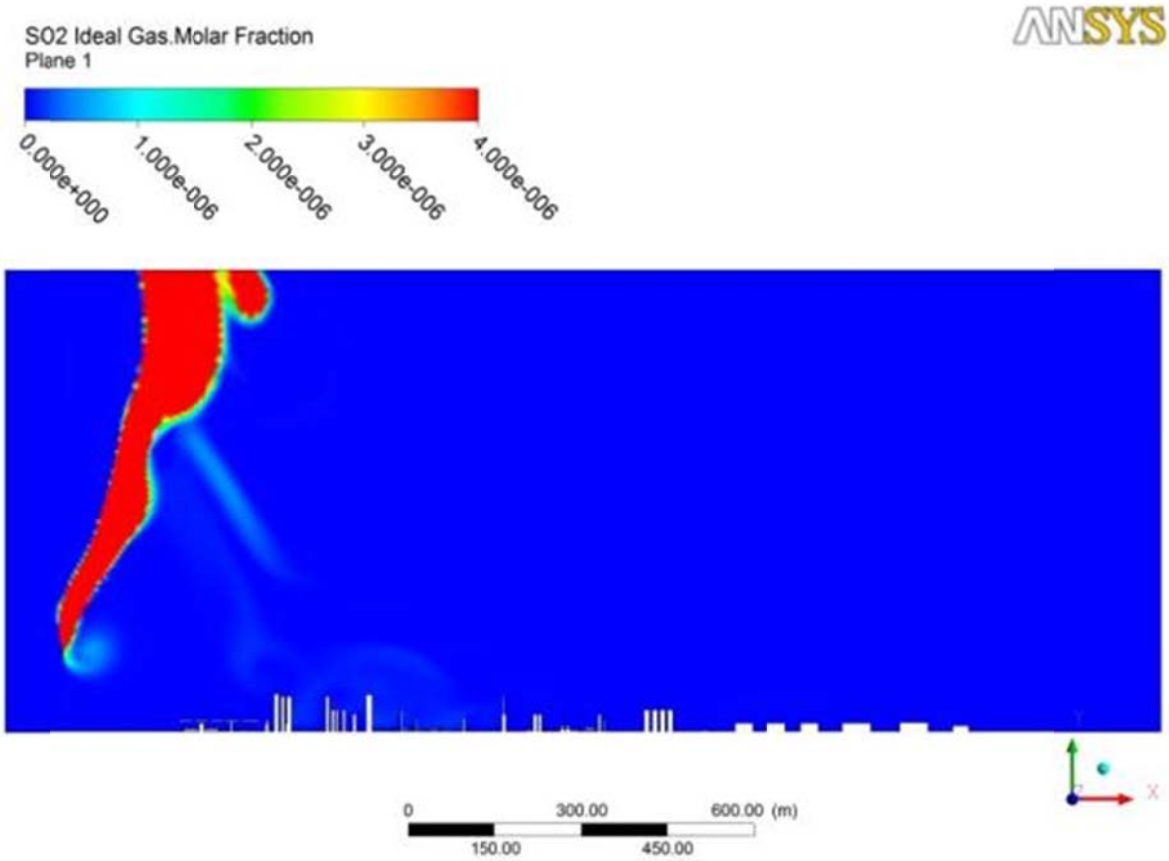


Figura 91: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 16.

Verifica-se que a pluma apresenta certa turbulência, conforme esperado para classe de estabilidade atmosférica instável na Figura 12.

Na condição de atmosfera instável a pluma não atinge o solo em concentrações que causem impacto à saúde humana e a variação de vazão não afeta no formato da pluma e nem nos níveis de concentração dos poluentes.

5.17 Caso 17

Neste caso foram considerados os seguintes parâmetros: Classe de estabilidade C, vento de referência de 5 m/s, sem a ocorrência de inversão térmica e vazão normal de operação do *flare*.

Para o Caso 17 variou-se apenas a vazão de emissão para 156 kg/s, em relação ao Caso 5. Verifica-se que a pluma apresenta perfil conforme mostrado na Figura 12 para atmosfera instável, e comparado ao Caso 5 está levemente mais turbulenta e com menor concentração dos poluentes, devido à vazão reduzida.

A seguir, estão as Figuras 92, 93 e 94 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 17.

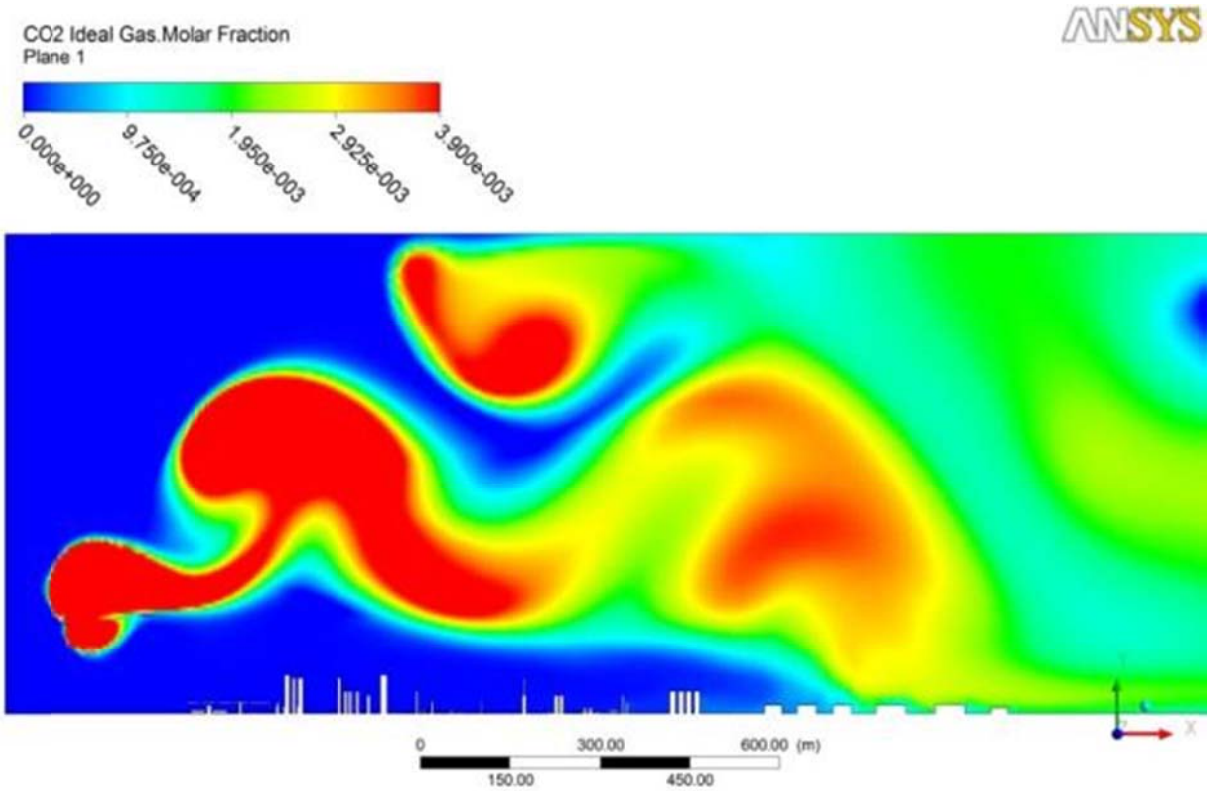


Figura 92: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 17.

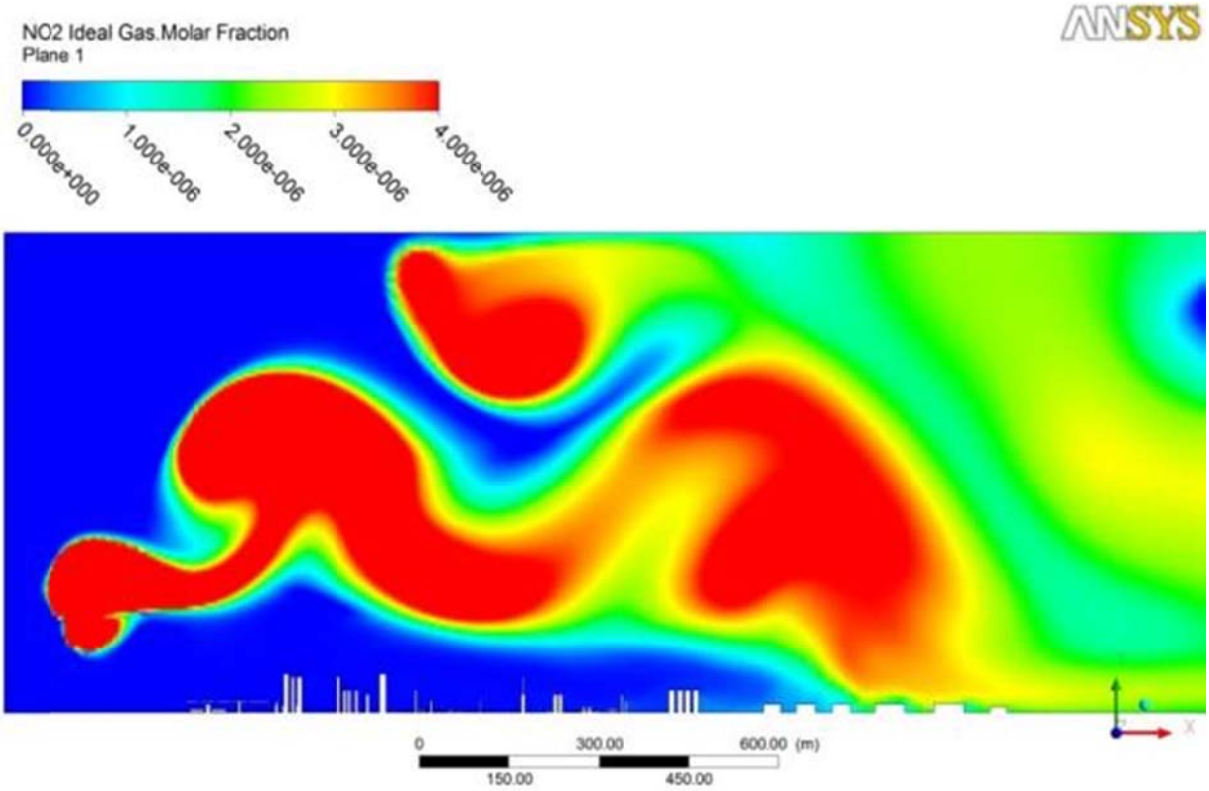


Figura 93: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 17.

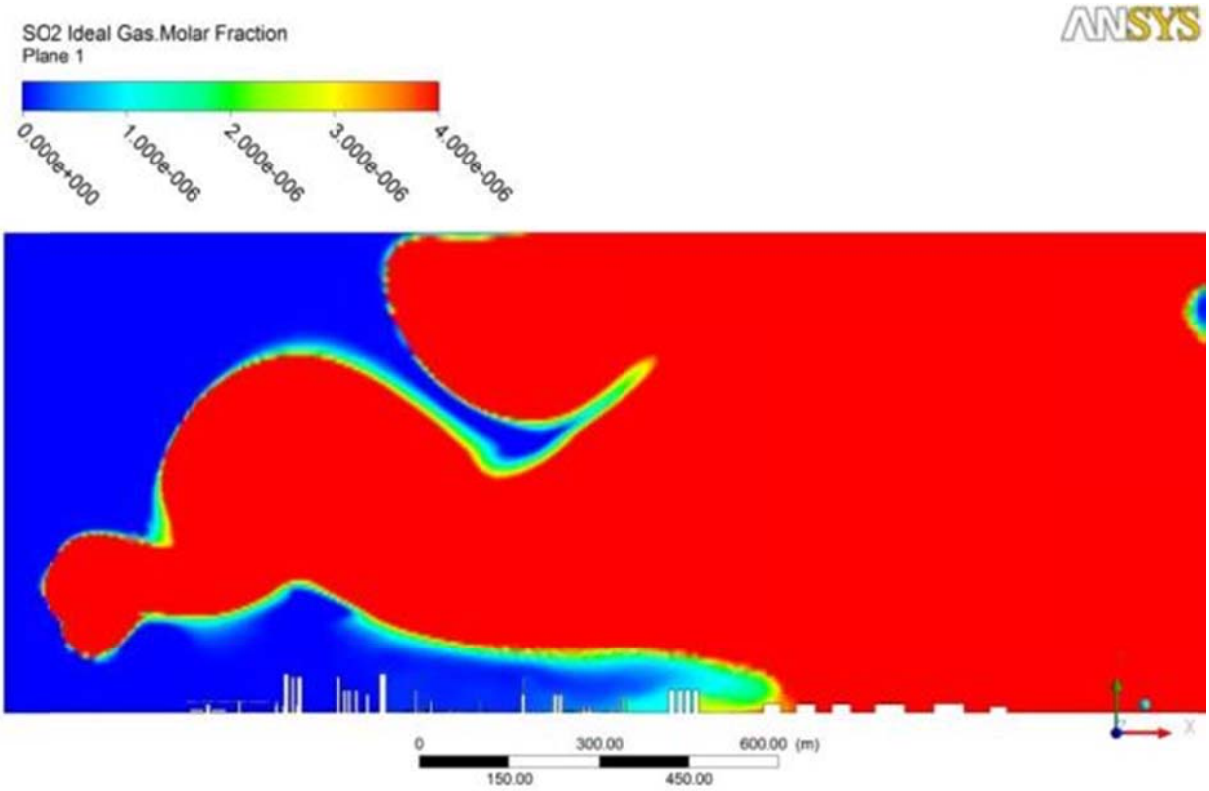


Figura 94: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 17.

Neste caso a pluma atinge o solo no limite de tolerância de SO_2 a

aproximadamente 1,1km de distância da tocha, valor maior que no Caso 5. Nota-se que a diferença de vazão não impactou muito na concentração dos poluentes ao nível do solo. Para este caso também vale ressaltar que são encontradas, no nível do solo, concentrações de CO_2 e NO_2 que requerem medidas preventivas a fim de que os limites de tolerância não sejam ultrapassados.

5.18 Caso 18

O Caso 18 equivale ao Caso 6, atmosfera levemente instável, vento de referência 10 m/s, sem ocorrência de inversão térmica, sendo que com vazão de emissão de 156 kg/s (vazão normal de operação).

A Figura 95 mostra que a pluma apresenta as mesmas características do Caso 6, com tendência a ascensão devido ao perfil de velocidades do vento, porém menos oscilante. Desta forma, a pluma é arrastada pelo vento assumindo a sua velocidade ao longo do domínio.

Em comparação com o Caso 17, onde a velocidade do vento é menor mantendo-se os demais parâmetros, verifica-se que a pluma do Caso 18 é muito mais estreita e os poluentes apresentam menor dispersão vertical devido ao efeito de deslocamento horizontal promovido pelo vento.

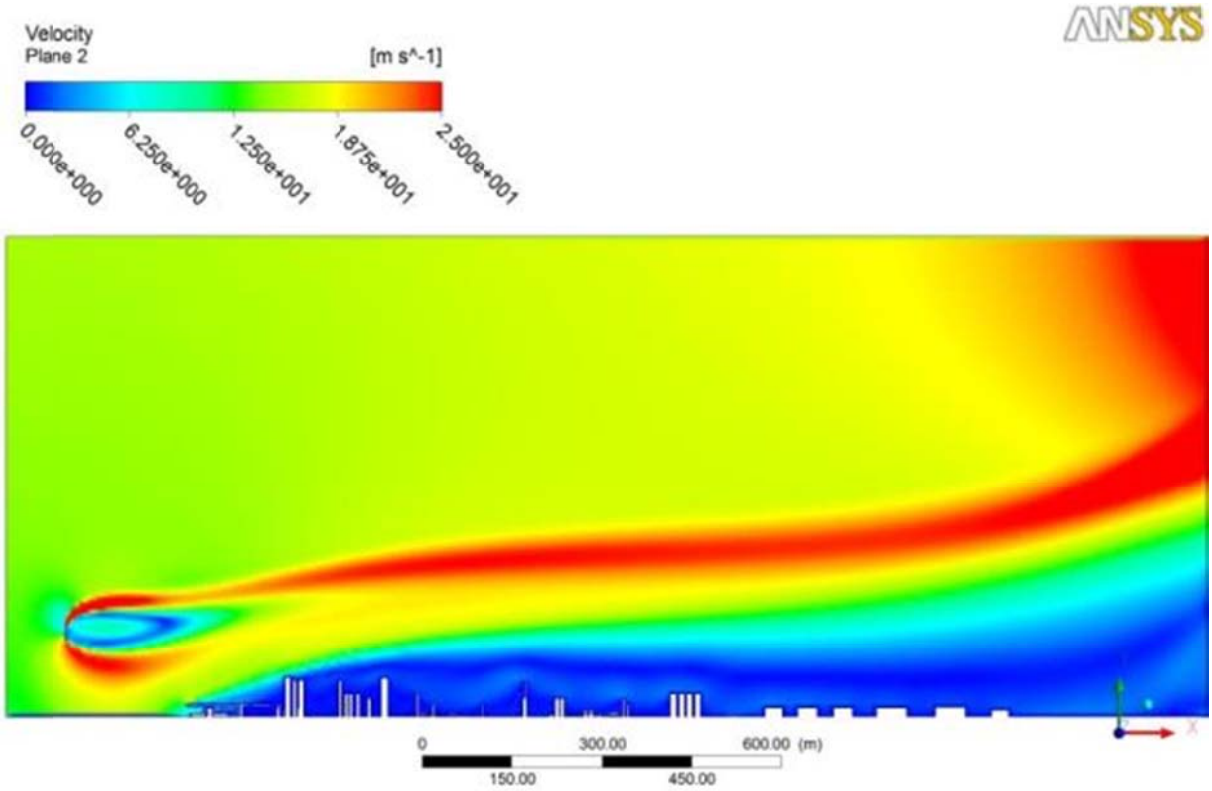


Figura 95: Perfil de velocidades do caso 18

Neste caso, os limites de tolerância não são alcançados no nível do solo para nenhum dos poluentes.

A seguir estão as Figuras 96, 97 e 98 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 18.

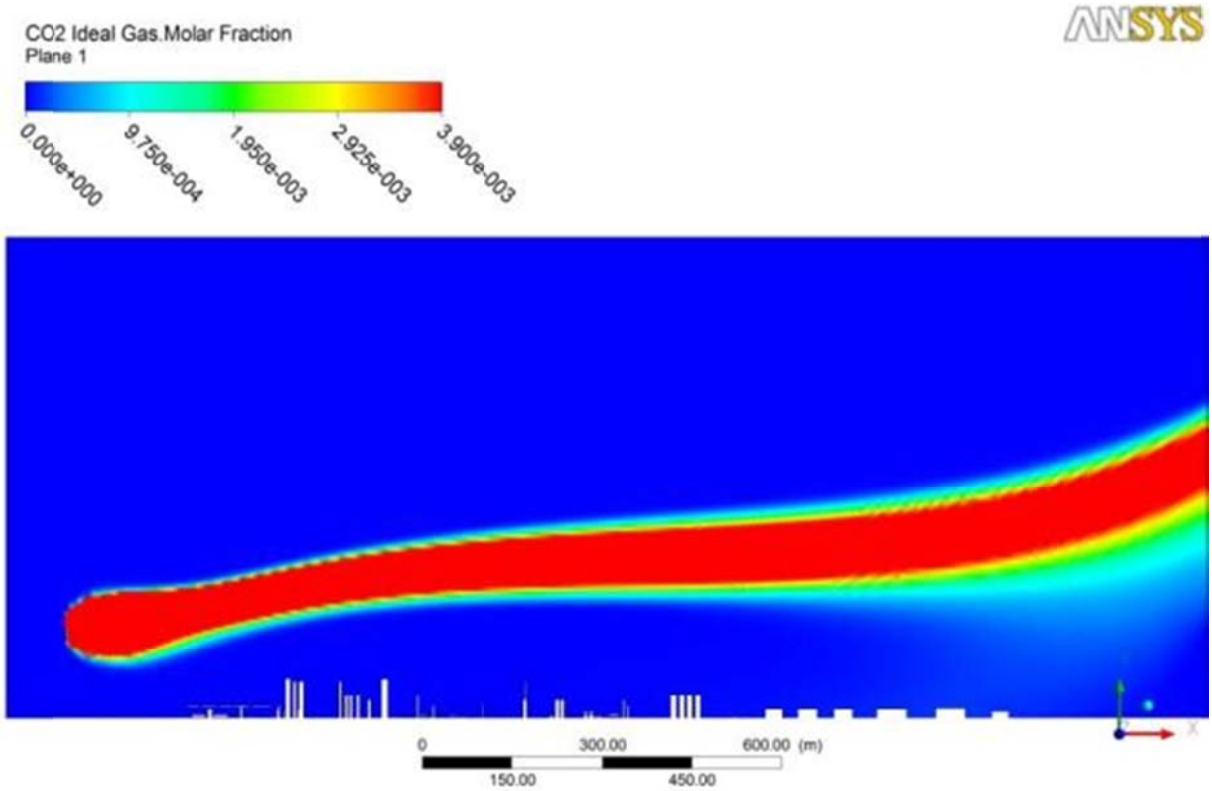


Figura 96: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 18.

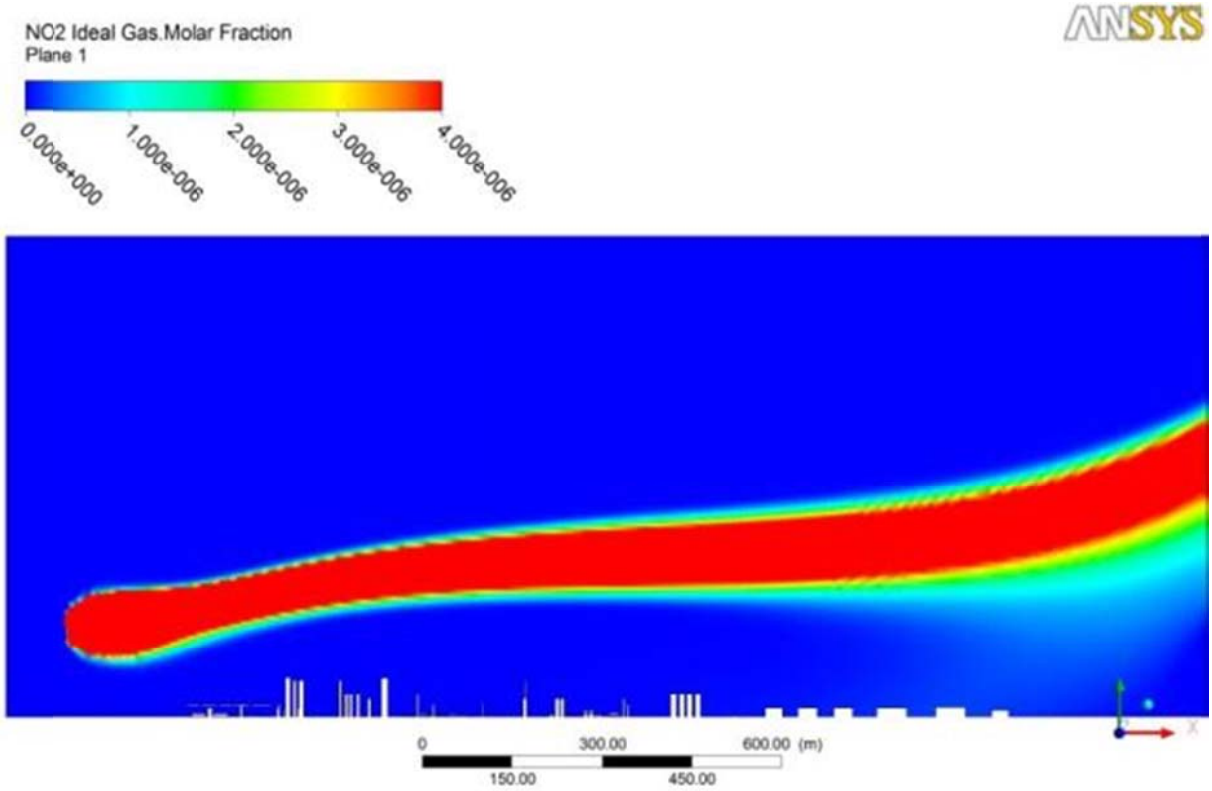


Figura 97: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 18.

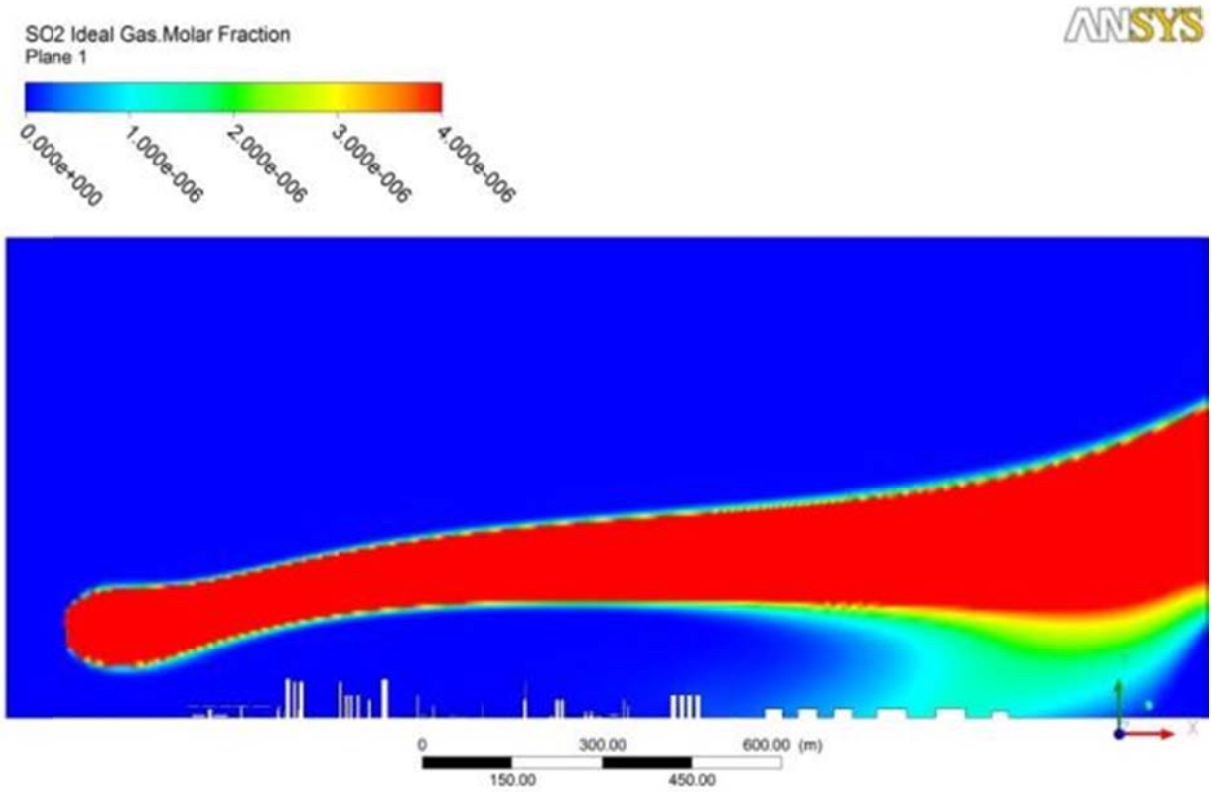


Figura 98: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 18.

5.19 Caso 19

Este caso é semelhante ao Caso 7, com classe de estabilidade neutra (D) e velocidade do vento de 5 m/s a 10 m de altura, somente variando a vazão de emissão para 156kg/s (vazão normal de operação do *flare*).

Em comparação com o Caso 7, verifica-se uma maior diluição da pluma no Caso 19 devido à menor quantidade de gases emitidos. Com a redução da vazão, percebe-se que a pluma passa a apresentar tendência a descer, característico de atmosfera neutra.

A seguir estão as Figuras 99, 100 e 101 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 19.

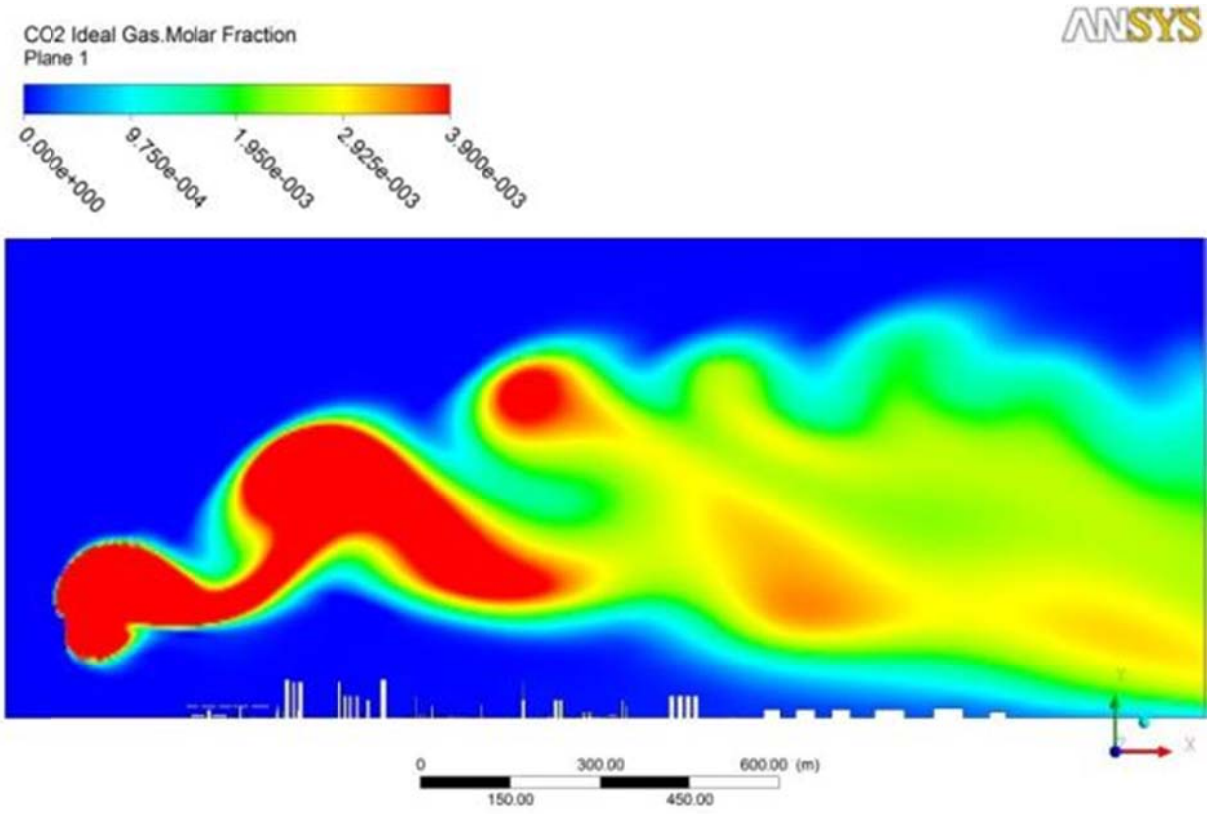


Figura 99: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 19.

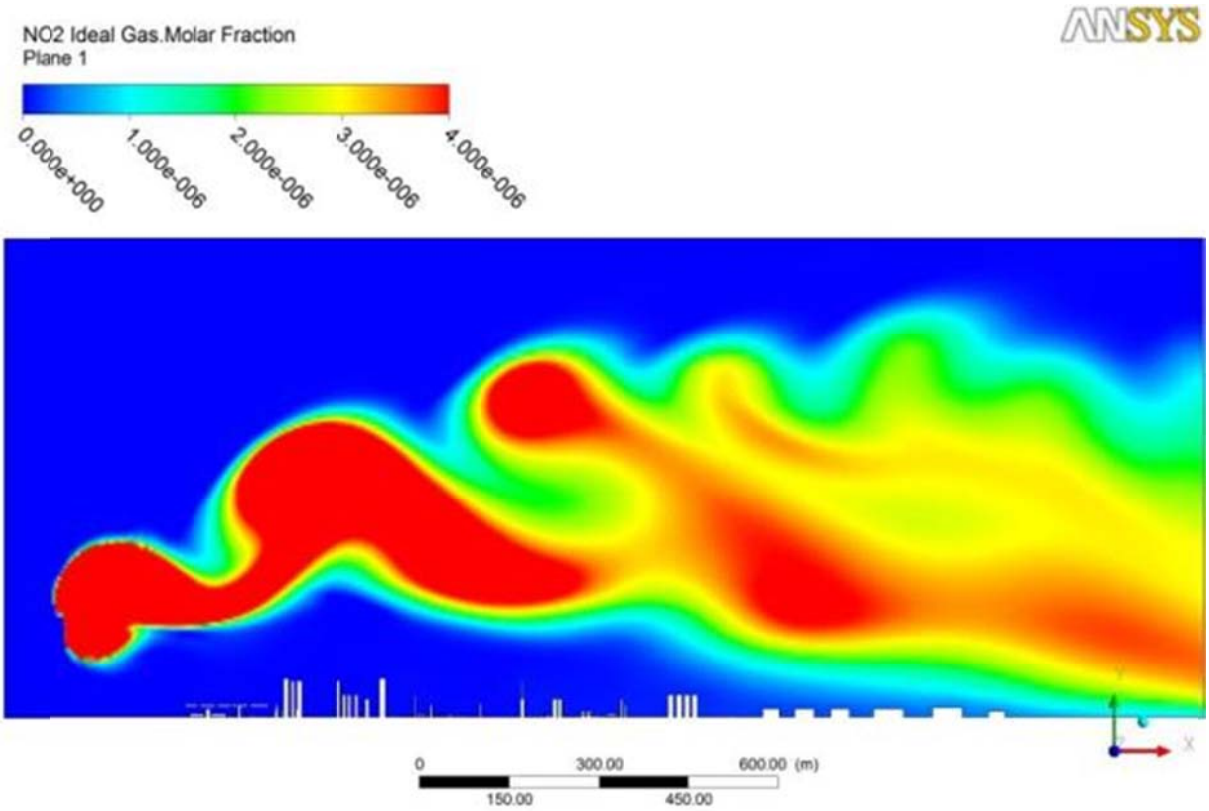


Figura 100: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 19.

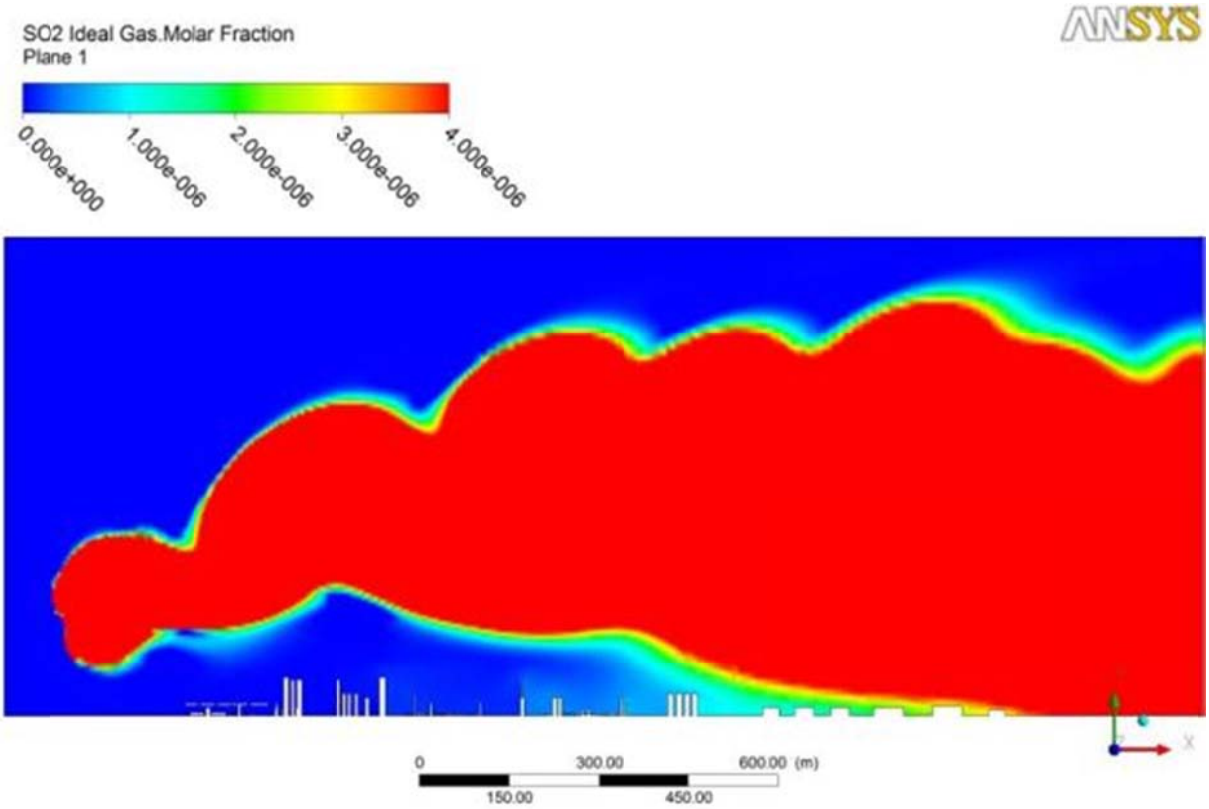


Figura 101: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 19.

Apenas para o SO_2 a pluma atinge o solo em seu limite de tolerância, a 1,5 km de distância da fonte de emissão. No entanto, cabe avaliar a dispersão a distâncias maiores que a limitada pelo domínio adotado, pois apesar dos poluentes CO_2 e NO_2 se dispersarem ao longo do domínio devido às suas baixas concentrações na fonte de emissão, a concentração indicada a baixas altitudes e longas distâncias em relação ao *flare* está próxima do limite de tolerância desses gases, dentro do chamado nível de ação, onde são requeridas medidas preventivas.

5.20 Caso 20

Neste caso foi considerada atmosfera neutra (classe D), ventos de 10 m/s a 10 m de altura e vazão de emissão igual a 156 kg/s.

Em comparação com o Caso 8, onde apenas variou-se a vazão para 389 kg/s (vazão de contingência) verifica-se que a pluma apresenta as mesmas características, porém um pouco mais estreita. Com a vazão reduzida os limites de tolerância não foram atingidos ao nível do solo para nenhum poluente dentro do domínio adotado. No entanto, devido à tendência da pluma em descer (por efeito da classe de estabilidade da atmosfera) e, como mostrado no Caso 8 que em vazão maior esses limites são atingidos, provavelmente os limites permitidos serão ultrapassados para um domínio com maior comprimento.

A tendência da pluma a descrever uma trajetória descendente pode ser explicada devido à sua densidade ser superior à do ar e pelo fato do perfil do vento ser praticamente constante ao longo do plano horizontal, não exercendo, assim, influência sobre a trajetória da pluma. Ver Figura 102.

A seguir, estão as Figuras 103, 104 e 105 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 20.

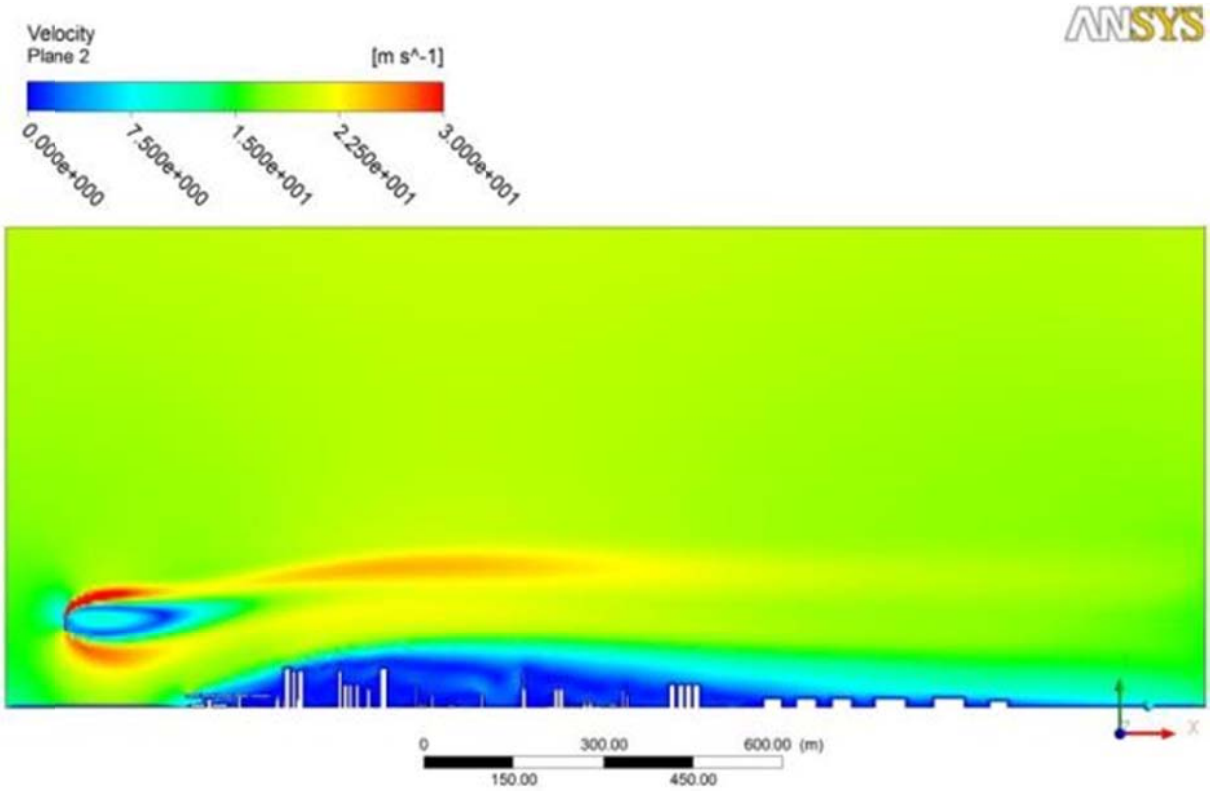


Figura 102: Perfil de velocidades do Caso 20.

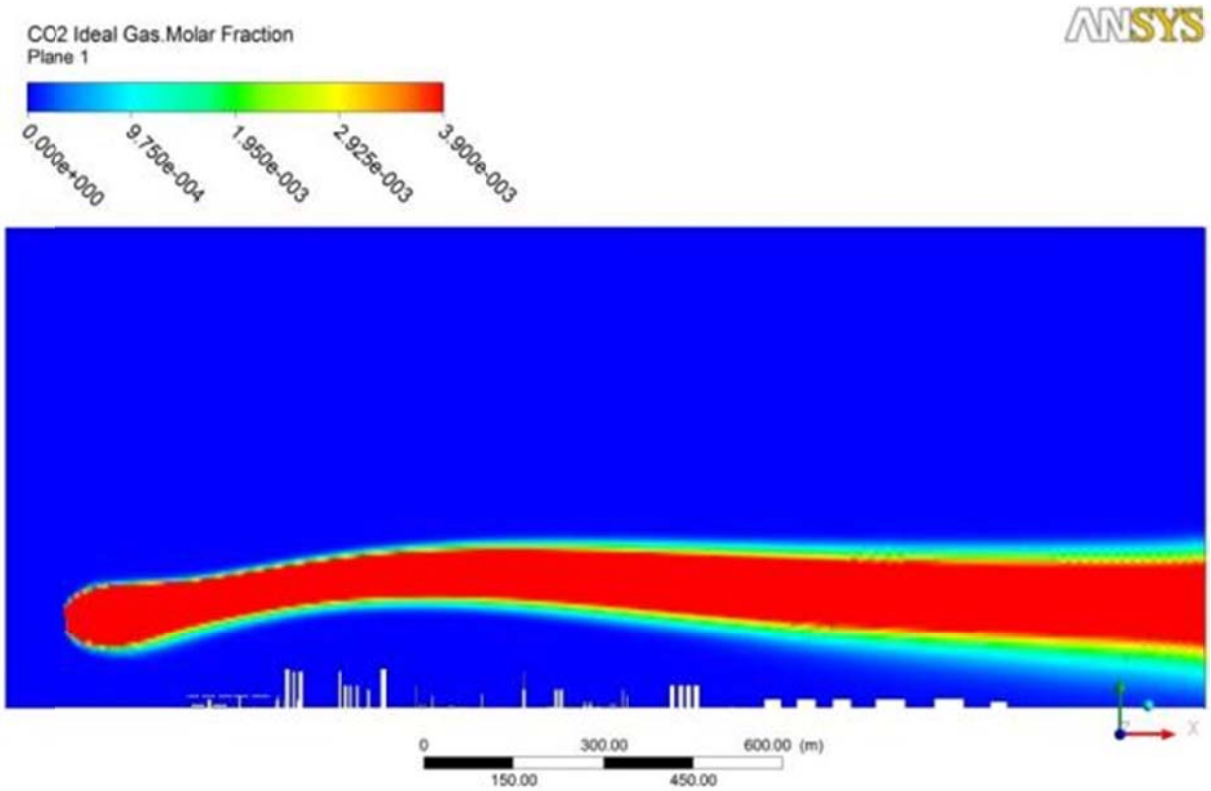


Figura 103: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 20.

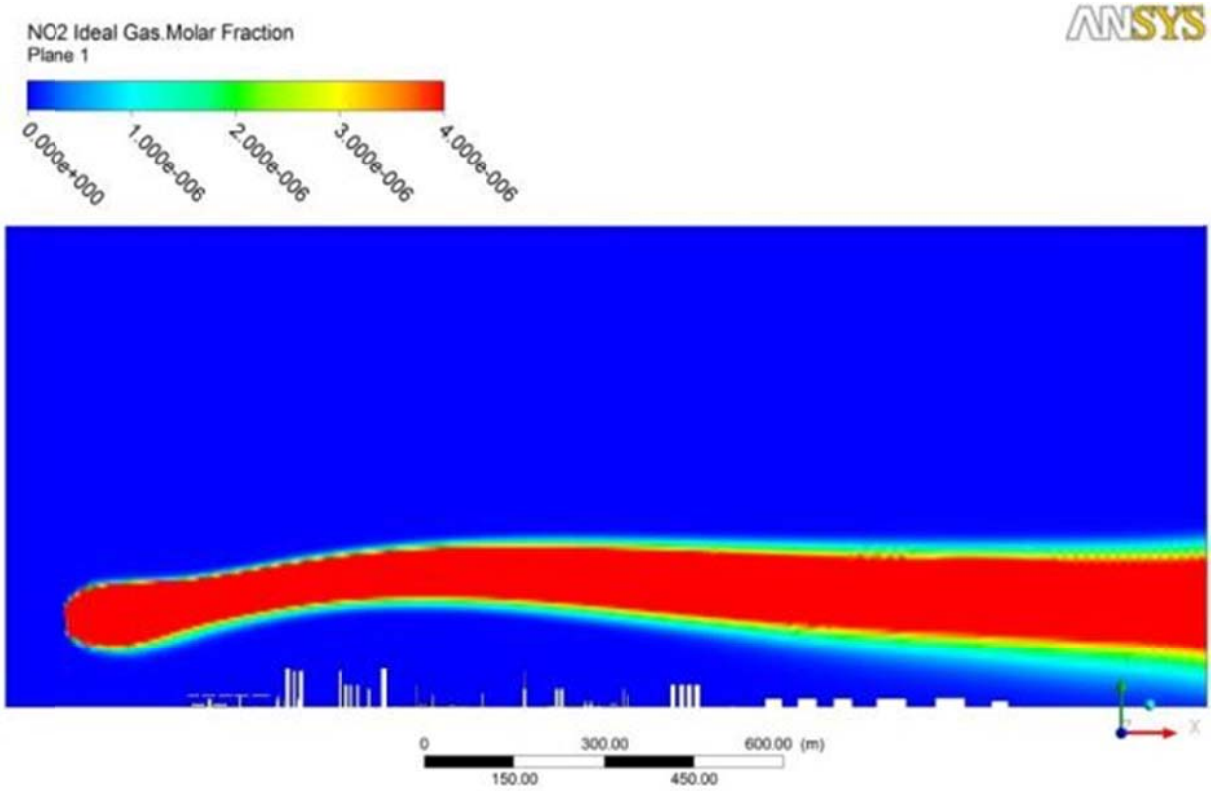


Figura 104: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 20.

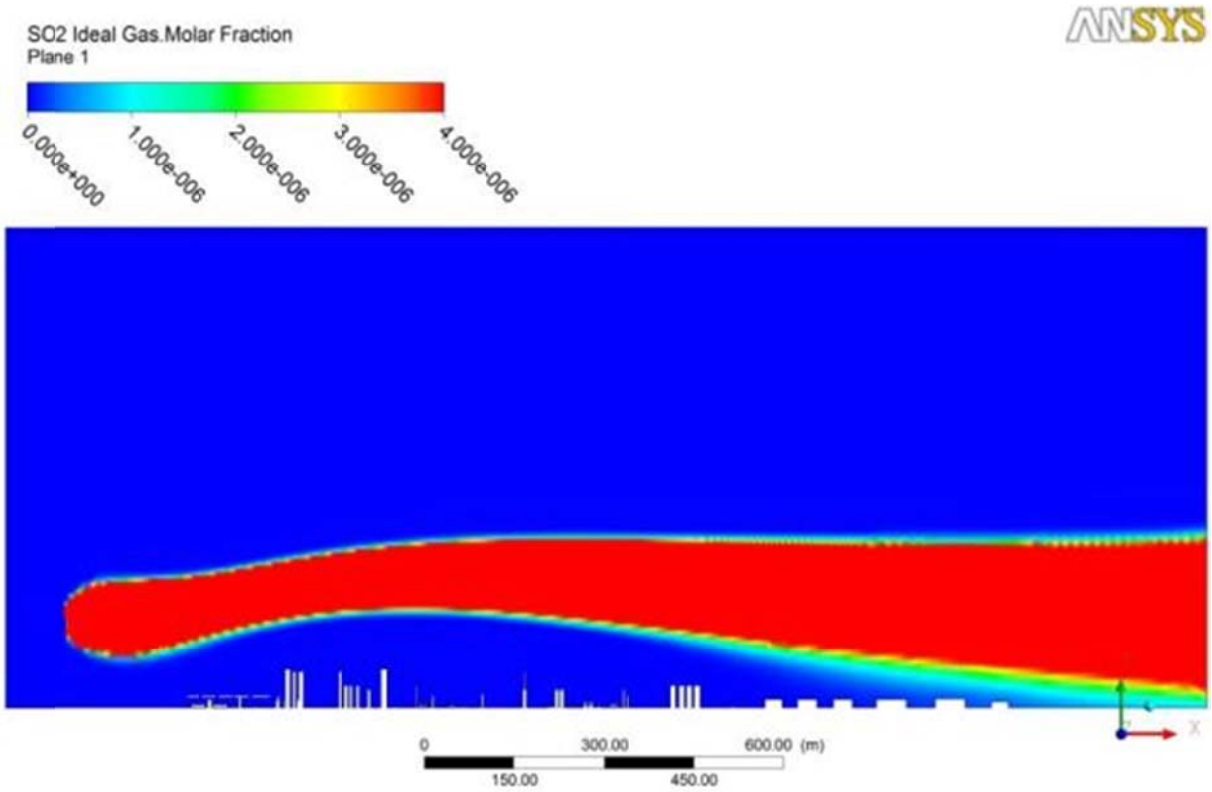


Figura 105: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 20.

5.21 Caso 21

Assim como no Caso 9, foi considerada atmosfera levemente estável (classe E) e velocidade do vento de 3 m/s a 10m de altura, porém com vazão reduzida (equivalente a Ma=0.2). A pluma apresenta o mesmo perfil, porém um pouco mais estreita, devido à menor quantidade de gases emitidos e por consequência do maior efeito do vento sobre a pluma, visto que esta apresenta menor velocidade quando comparada ao Caso 9.

Ao contrário do apresentado no Caso 9, somente o limite de tolerância do SO_2 é encontrado no nível do solo e mais distante do *flare*, a aproximadamente 760 m, devido ao maior efeito de arraste exercido pelo vento sobre a pluma uma vez que a velocidade vertical da fonte de emissão está reduzida como consequência da menor vazão da emissão. Além disso, devido ao fato das concentrações de CO_2 e NO_2 serem inferiores às de SO_2, os efeitos difusivos foram suficientes para diluição desses poluentes ao longo da trajetória horizontal da pluma, o que não ocorreu com o SO_2.

A seguir estão as Figuras 106, 107 e 108 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 21.

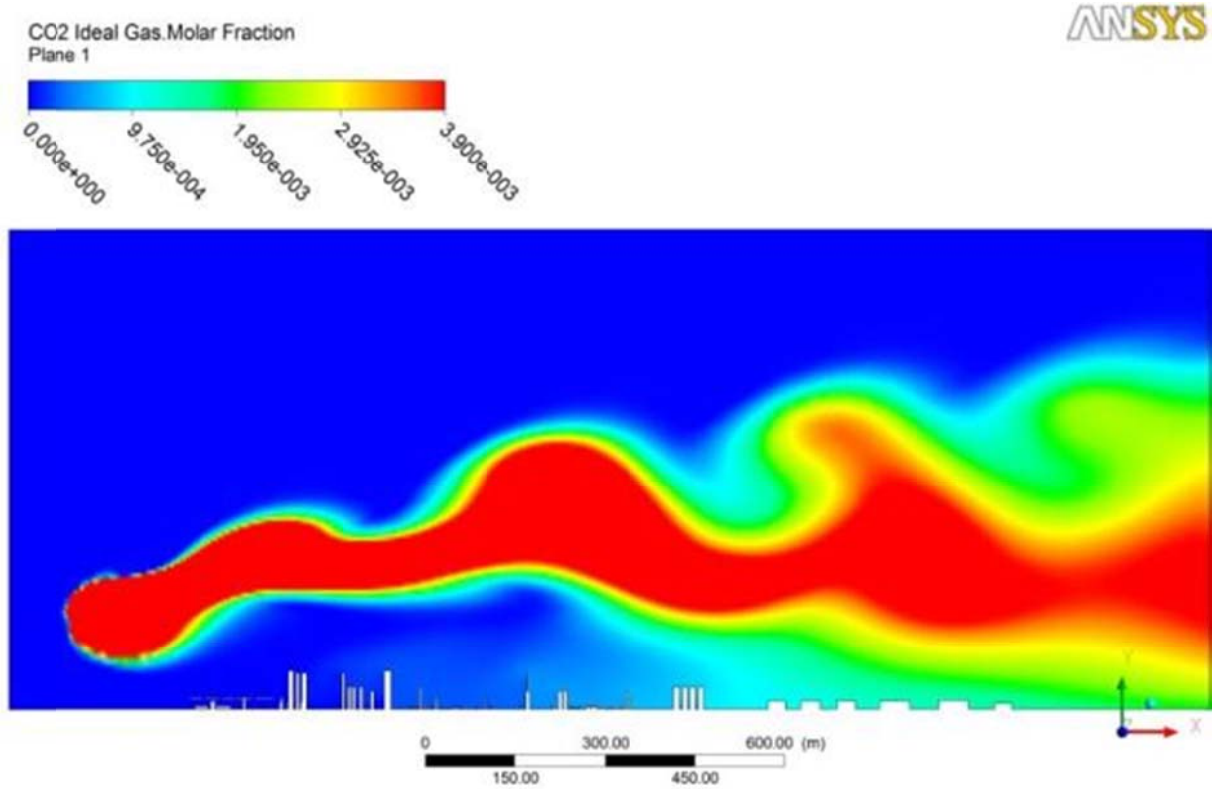


Figura 106: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 21.

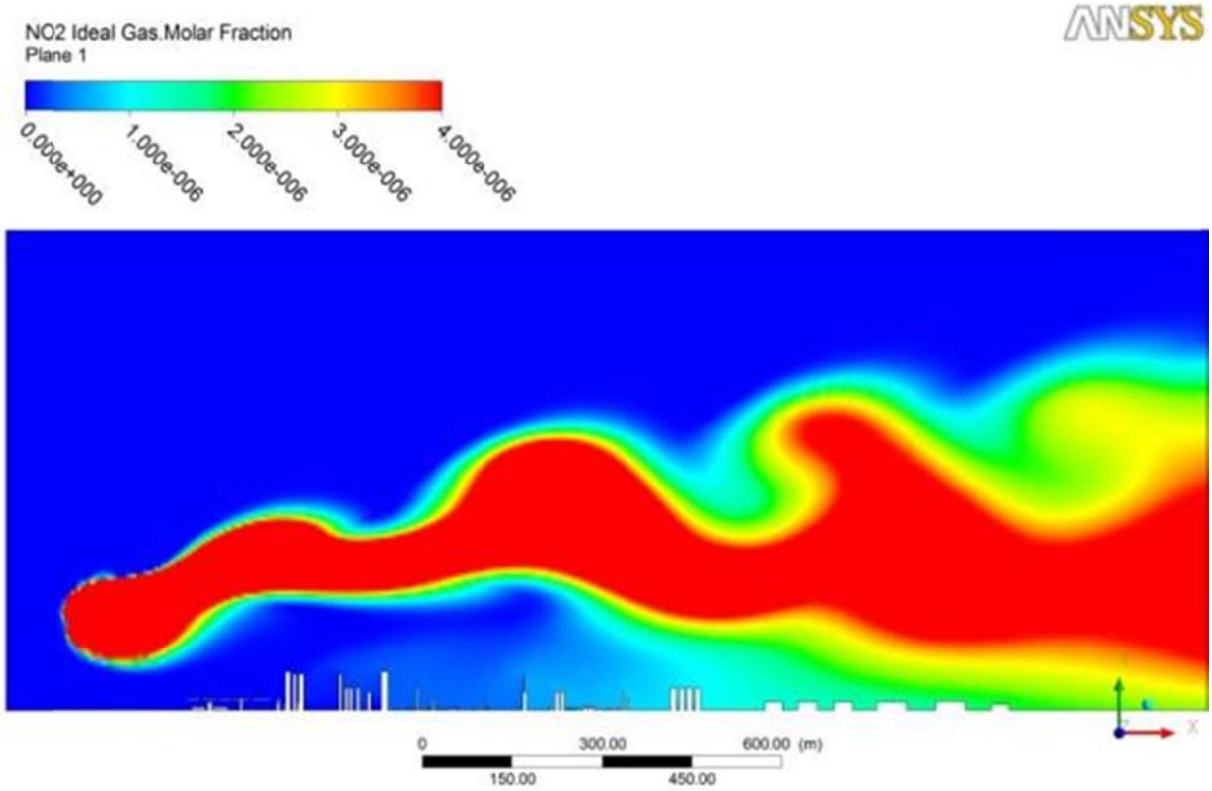


Figura 107: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 21.

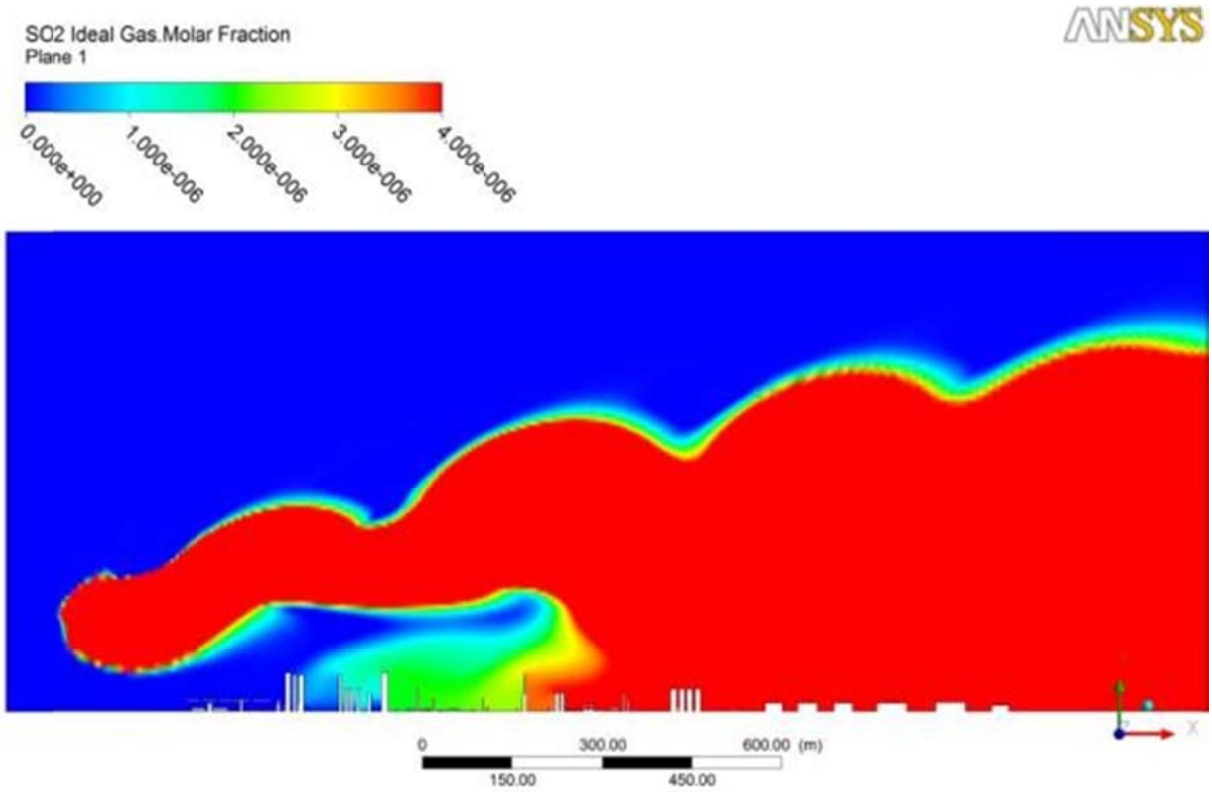


Figura 108: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 21.

5.22 Caso 22

Para o Caso 22 foram considerados os seguintes parâmetros: classe de estabilidade levemente estável (classe E), vento de 5 m/s a 10 m de altura e vazão normal de operação (156 kg/s).

Em relação ao Caso 10 variou-se apenas a vazão de 389kg/s para 156 kg/s. Portanto, essas plumas são bem semelhantes, apresentando esta última formato mais retilíneo.

Em comparação ao Caso 19, onde foi simulado com a mesma vazão, mesma velocidade de vento e apenas alterando a classe de estabilidade (neutra), verifica-se que o efeito da turbulência gerada pela condição da atmosfera no Caso 19, gerou uma maior dispersão vertical da pluma, reduzindo os níveis de concentração. Para o caso do SO_2, que está presente em maior proporção na mistura, constata-se que o efeito da menor turbulência sobre a pluma no Caso 22 tornou a pluma mais concentrada, porém, afetando uma área menor com limites acima dos permitidos.

Nota-se a tendência da pluma em descer (devido aos efeitos da classe de estabilidade) assim como no Caso 20, provavelmente atingindo os limites de tolerância em distâncias superiores ao comprimento do domínio adotado.

A seguir estão as Figuras 109, 110 e 111 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 22.

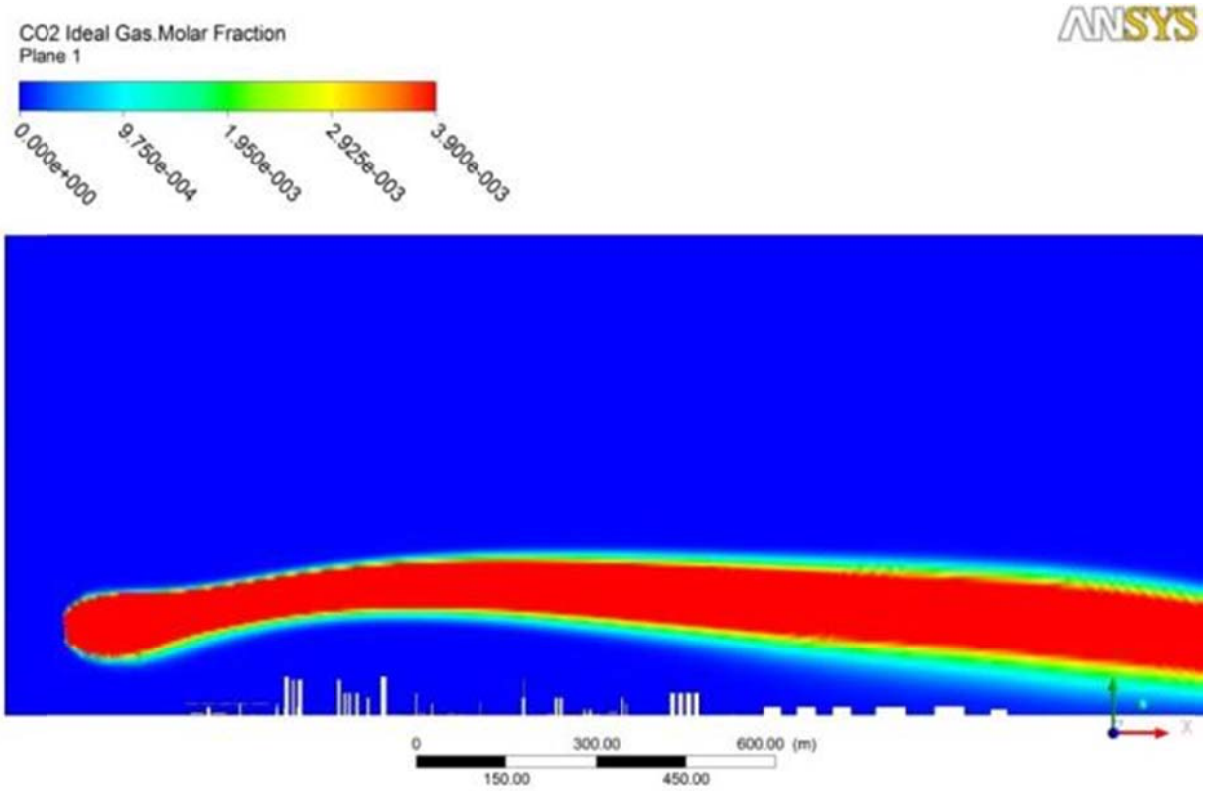


Figura 109: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 22.

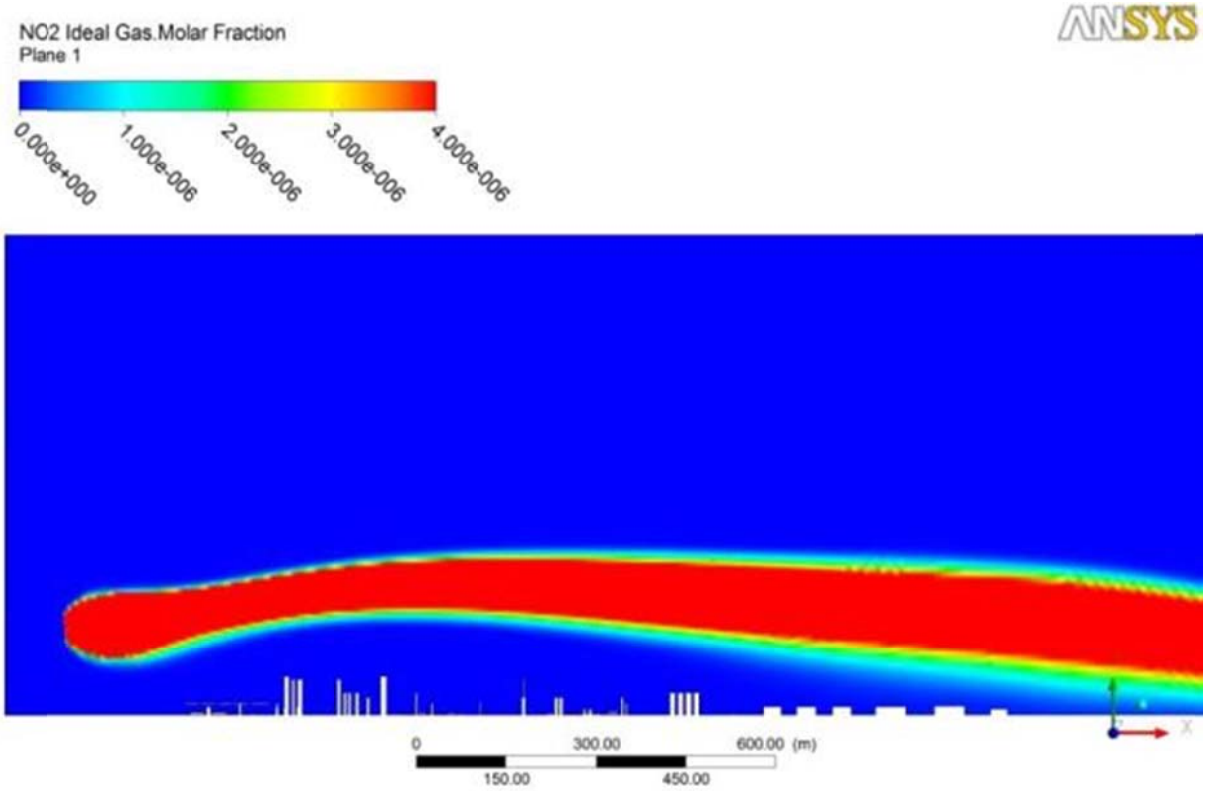


Figura 110: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 22.

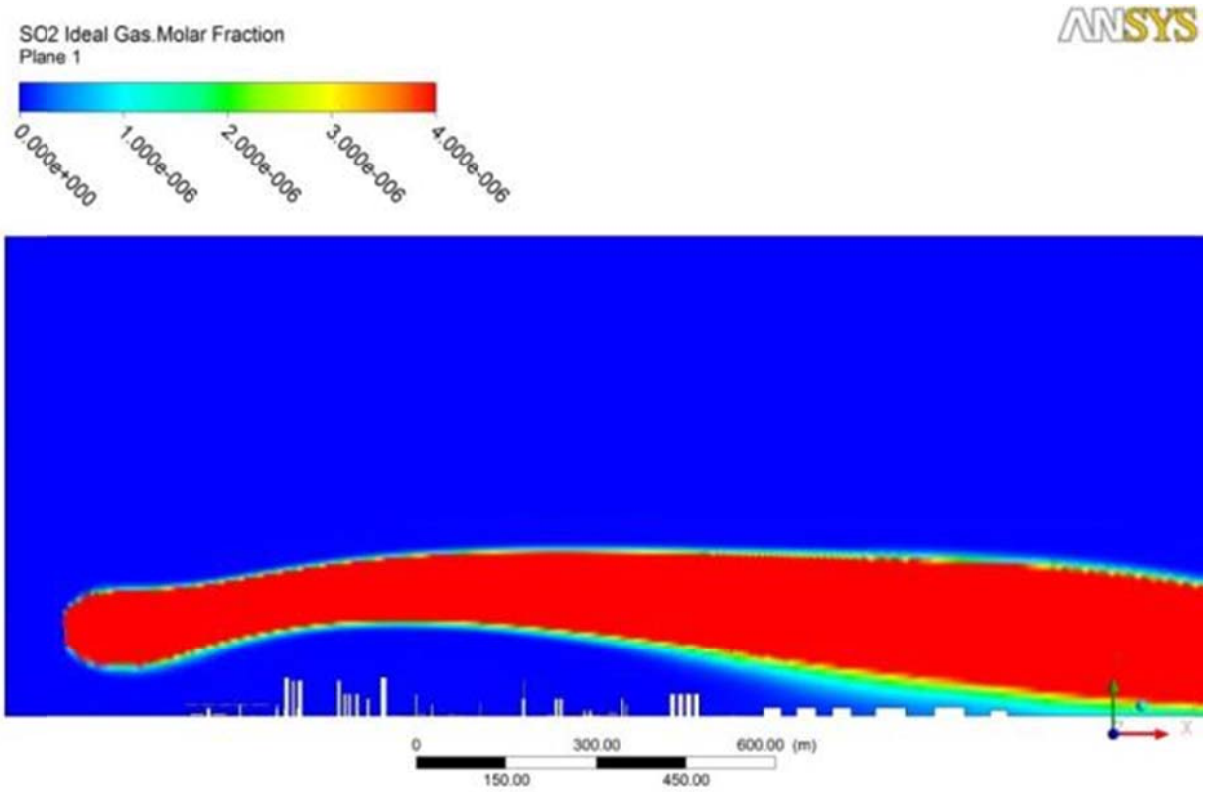


Figura 111: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 22.

5.23 Caso 23

Neste caso foi considerada atmosfera estável (classe F), vento de referência de 3 m/s e vazão normal de operação (156 kg/s).

Em comparação com o Caso 11, que foi considerada vazão de contingência, valem as mesmas observações do último caso, como pode ser visto nas Figuras 112, 113 e 114 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 23.

Pode-se concluir que a mudança de classe de estabilidade de levemente estável (Caso 22) para estável (Caso 23) não apresenta impactos relevantes sobre a dispersão da pluma quando em vazões normais de operação.

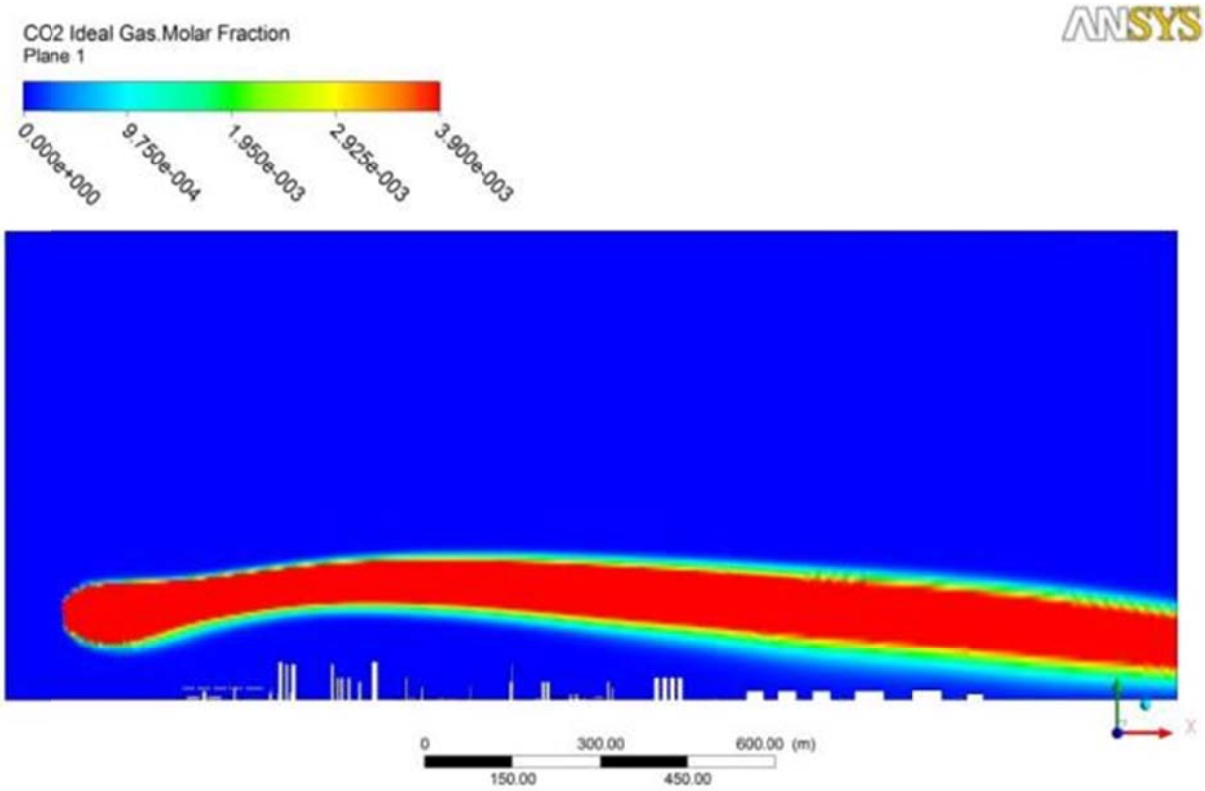


Figura 112: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 23.

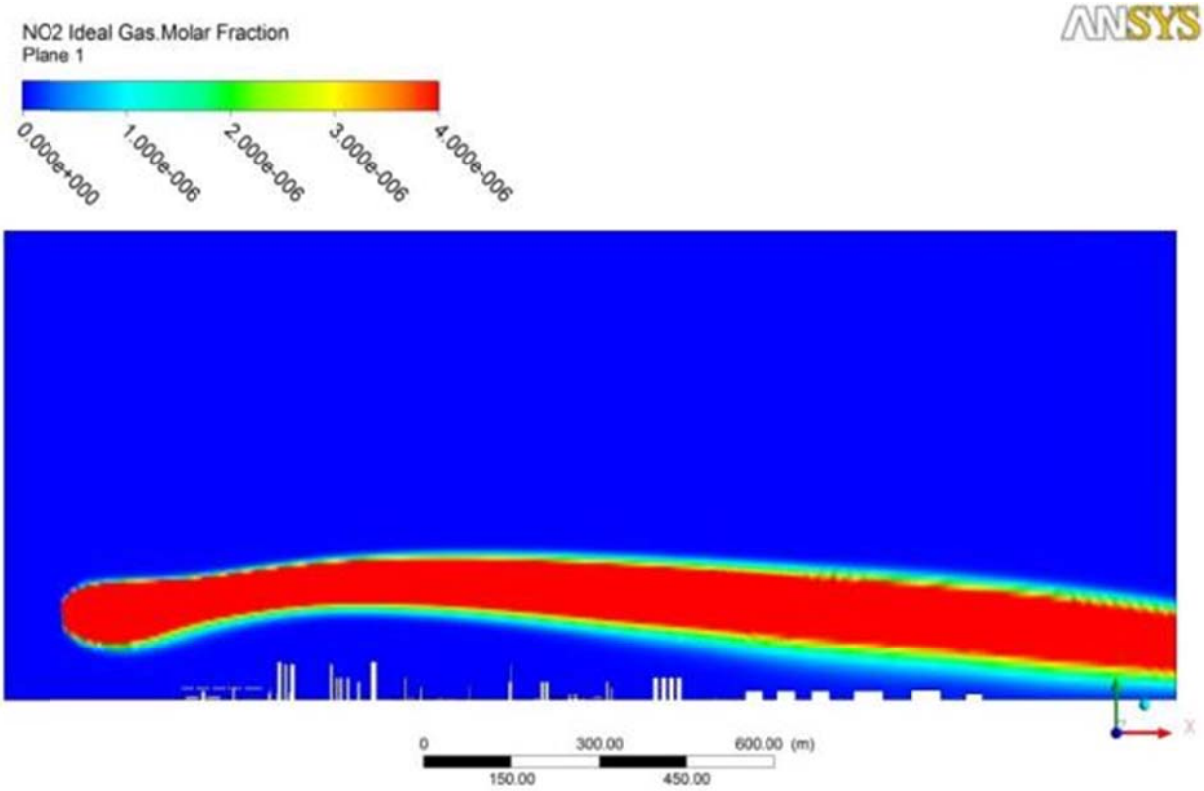


Figura 113: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 23.

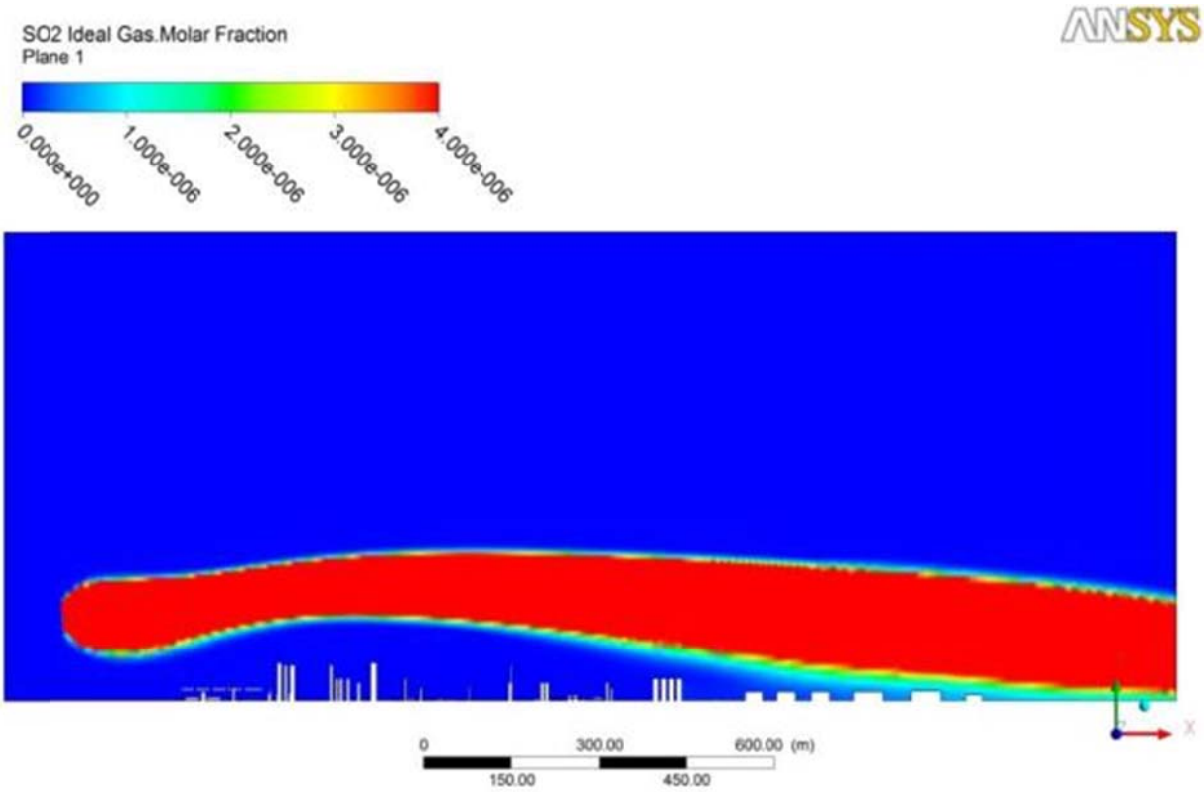


Figura 114: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 23.

5.24 Caso 24

Neste caso foi considerada vazão normal de operação (156 kg/s), atmosfera neutra (classe D), vento de referência de 5 m/s e ocorrência de inversão térmica.

Como este caso é equivalente ao Caso 12, com inversão térmica, mesmo vento de referência e atmosfera neutra, porém com redução na vazão de emissão para 40% da anterior, essas plumas apresentam as mesmas características tendo esta última menores concentrações. Ambas indicam elevadas concentrações de poluentes no topo do domínio, já que, devido à camada de inversão, a pluma fica retida. Com a vazão menor a pluma só alcançará o solo a níveis superiores aos limites de tolerância após o fim do domínio adotado, exceto para o SO_2, devido à sua maior proporção na mistura.

Em comparação com o Caso 19 (que apresenta as mesmas condições de vazão, classe de estabilidade e velocidade do vento, porém sem inversão térmica) verifica-se que a presença da camada de inversão afeta a concentração dos poluentes em altitudes próximas a ela, porém, não impacta na concentração ao nível do solo.

A seguir estão as Figuras 115, 116 e 117 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 24.

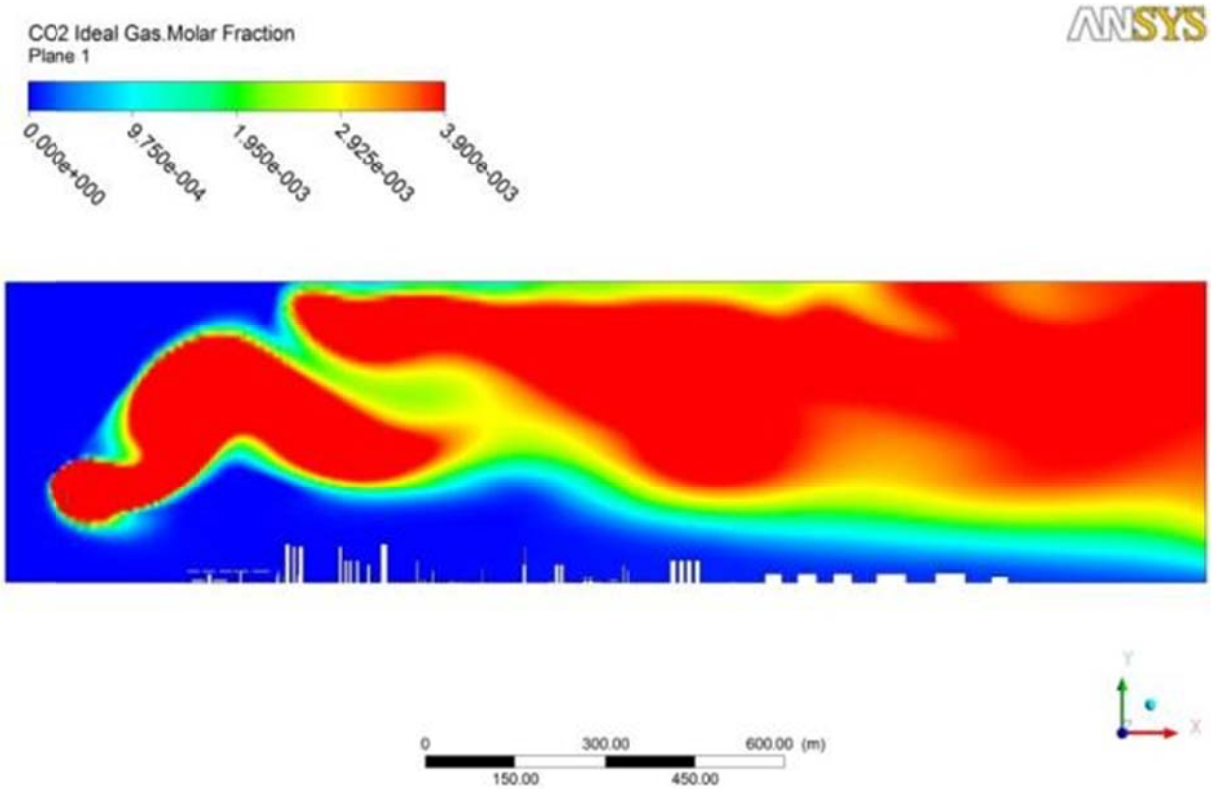


Figura 115: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 24.

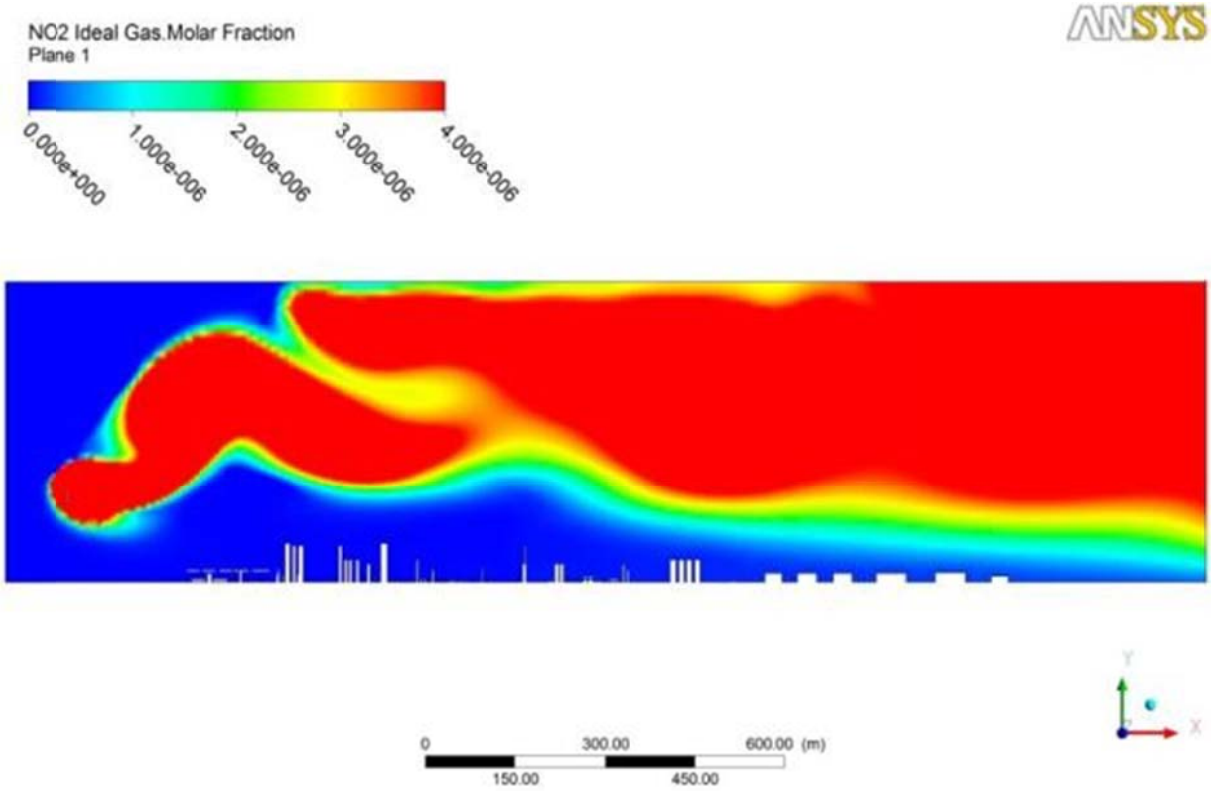


Figura 116: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 24.

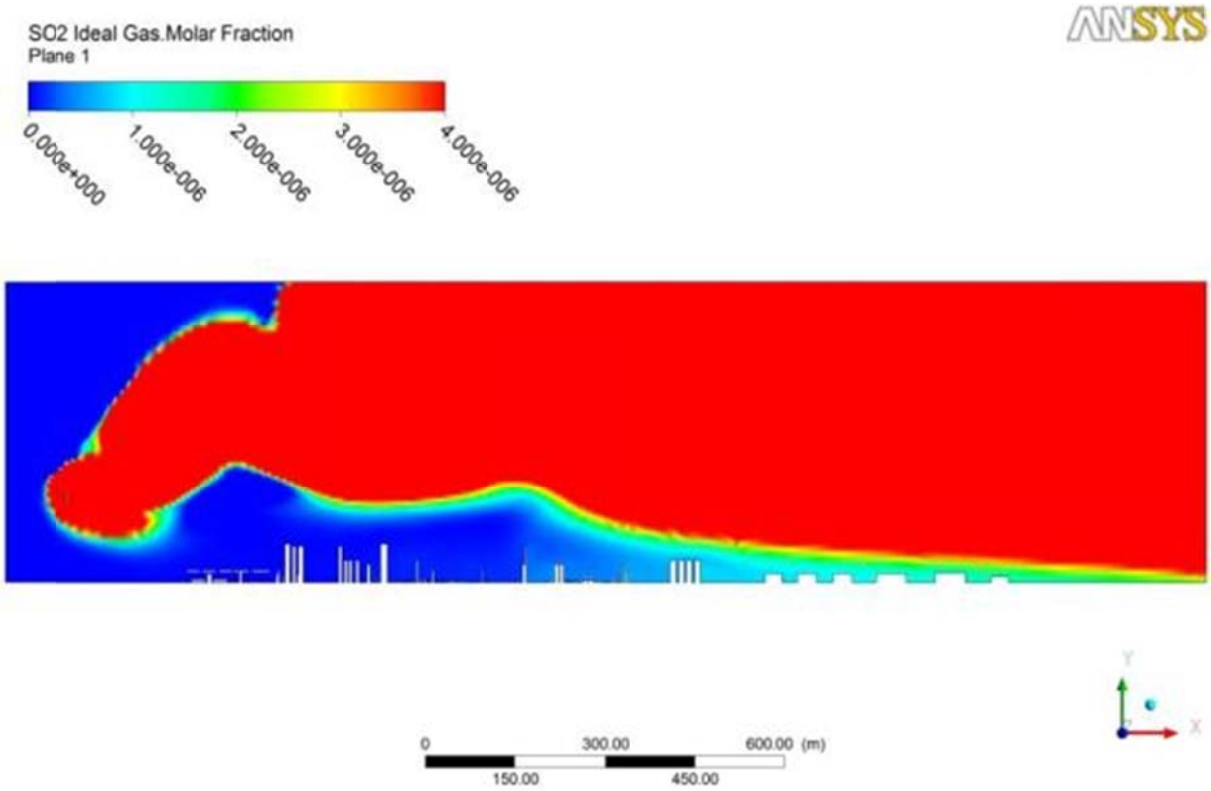


Figura 117: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 24.

5.25 Caso 25

Este caso apresenta as mesmas considerações quanto à estabilidade atmosférica, velocidade do vento e ocorrência de inversão térmica que o Caso 13, porém com vazão reduzida para 156 kg/s.

Verifica-se que no Caso 13 há uma maior concentração de poluentes ao longo de todo o domínio quando comparado ao Caso 25, o que se explica pela maior vazão de emissão no primeiro caso. Observa-se também que no caso de vazão reduzida, o vento consegue arrastar a pluma (devido a sua baixa velocidade vertical no ponto da emissão) tornando-a mais retilínea, o que permite o aumento da difusão dos poluentes antes que a nuvem atinja a camada de inversão. Dessa forma, o centro da pluma apresenta as maiores concentrações e, aparentemente, com a tendência a atingir o solo em concentrações superiores aos limites de tolerância a distâncias maiores que o domínio adotado para CO_2 e NO_2, e atingindo ainda dentro do domínio, concentrações que requerem medidas preventivas. Para o SO_2, a concentração limite atingiu o solo a 820 m de distância do *flare*.

Em comparação ao Caso 21, onde não foi considerada inversão térmica e foram mantidas as demais condições do Caso 25, verifica-se que a ocorrência de inversão térmica não afeta os níveis de concentração de poluentes, tanto ao nível do solo quanto em altitudes próximas à camada de inversão, em condições normais de operação do *flare* (vazão equivalente a Ma = 0,2).

As Figuras 118, 119 e 120 apresentam os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 25.

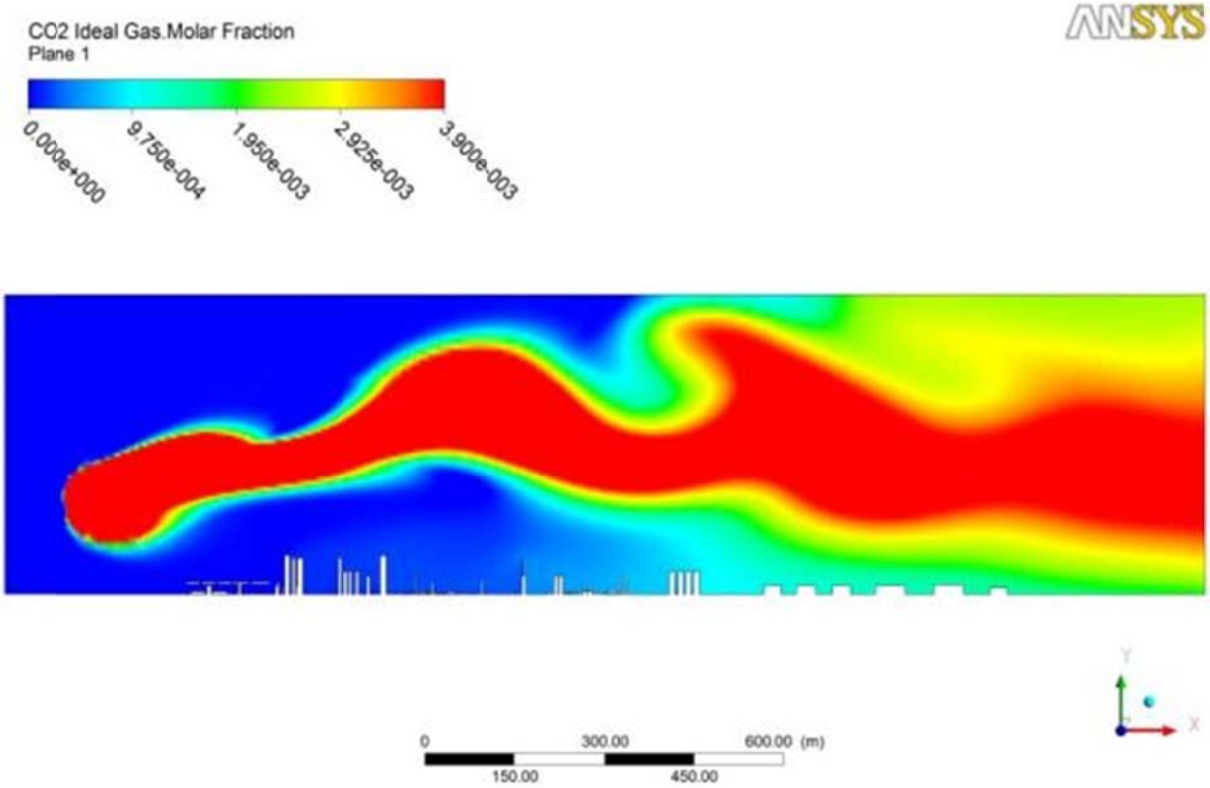


Figura 118: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 25.

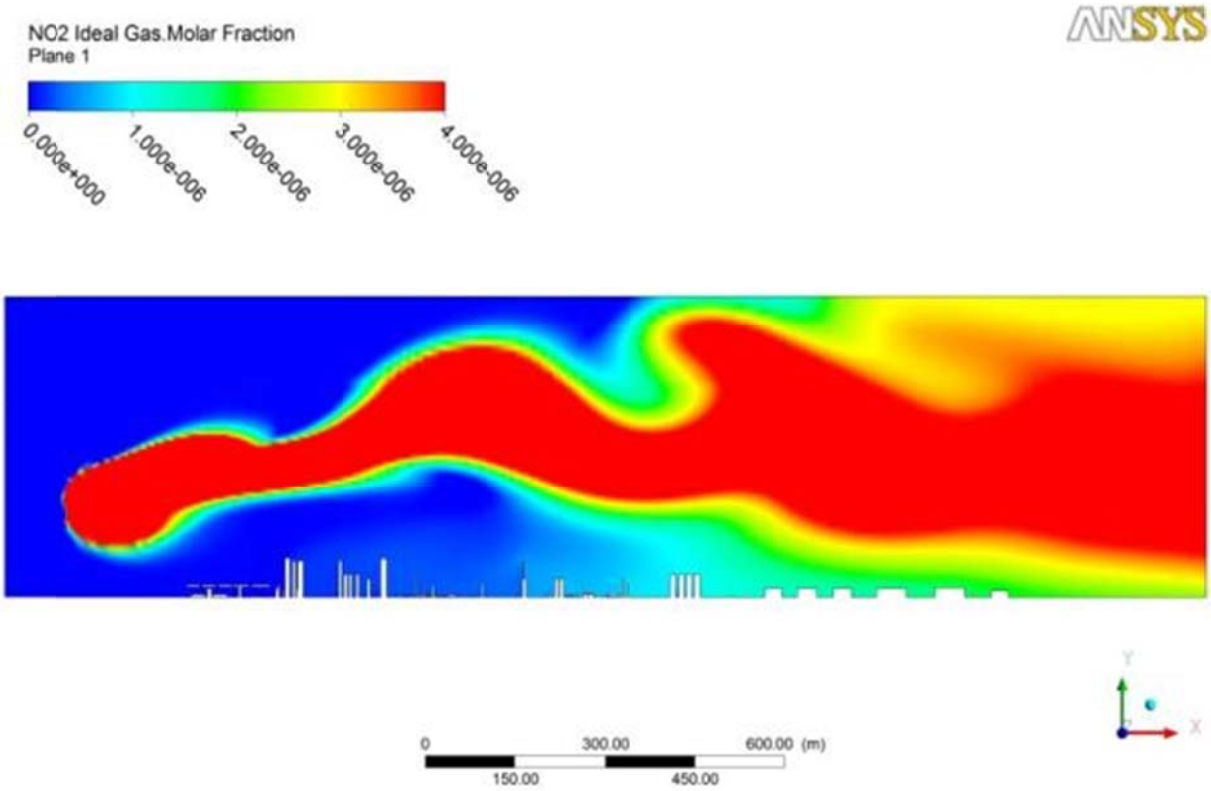


Figura 119: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 25.

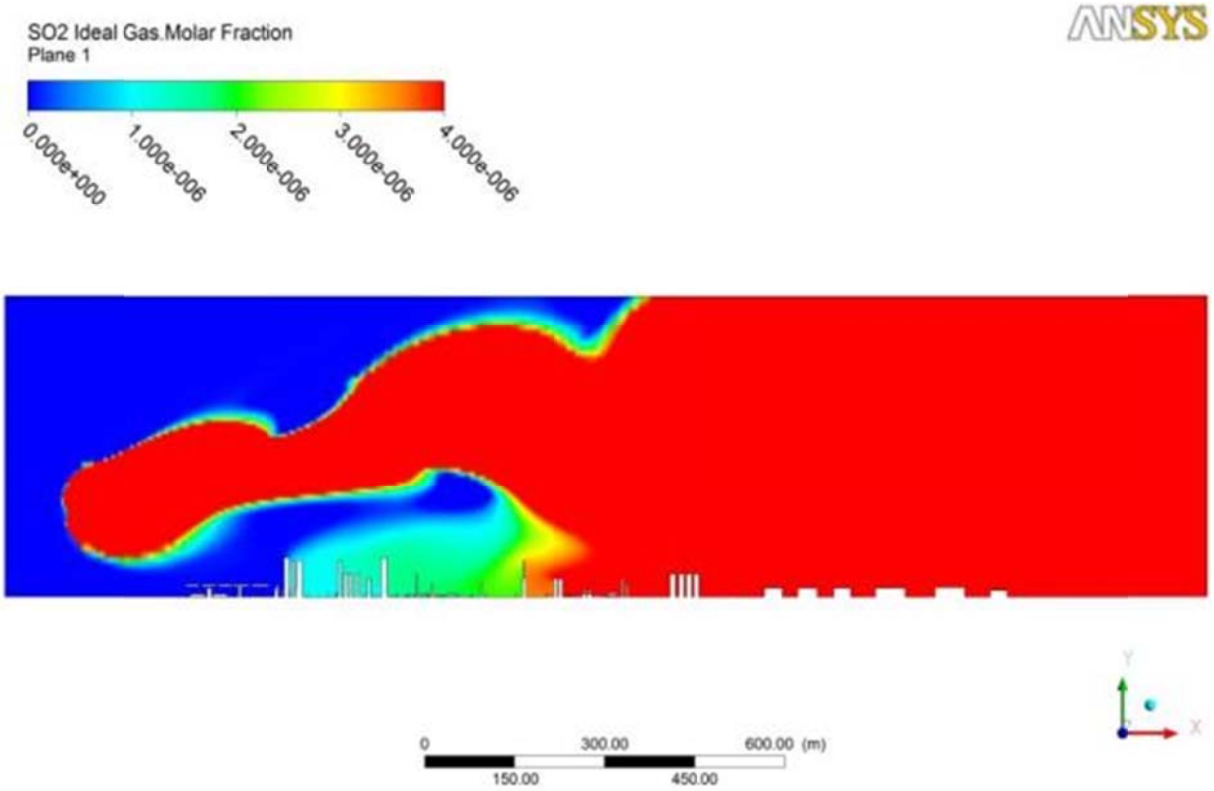


Figura 120: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 25.

5.26 Caso 26

Neste caso considerou-se atmosfera levemente estável (classe E), vento de referência de 5 m/s, vazão normal de operação (156 kg/s) e ocorrência de inversão térmica.

Com o aumento na velocidade do vento em relação ao Caso 25, a pluma neste caso apresenta perfil bem retilíneo e estreita característica de atmosfera estável conforme a Figura 12. O mesmo se verifica em comparação ao Caso 14, onde foi simulada uma vazão de emissão maior (389 kg/s). Desta forma, pode-se concluir que a intensidade do vento e da vazão emitida afetam o formato da pluma.

Dentro do domínio considerado no estudo, os limites de tolerância não foram atingidos na proximidade do solo, porém verifica-se uma tendência da pluma em descer e atingir o solo em algum ponto fora do domínio adotado, devendo ser considerado como nível de ação.

Em comparação com o Caso 22, onde não foi considerada ocorrência de inversão térmica, verifica-se que não houve qualquer interferência da inversão, visto que a pluma não alcança elevadas altitudes em função da estabilidade da atmosfera - que produz ventos muito elevados à medida que se afasta do solo - fazendo com que

a pluma seja arrastada horizontalmente, limitando o seu movimento vertical.

A seguir estão as Figuras 121, 122 e 123 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 26.

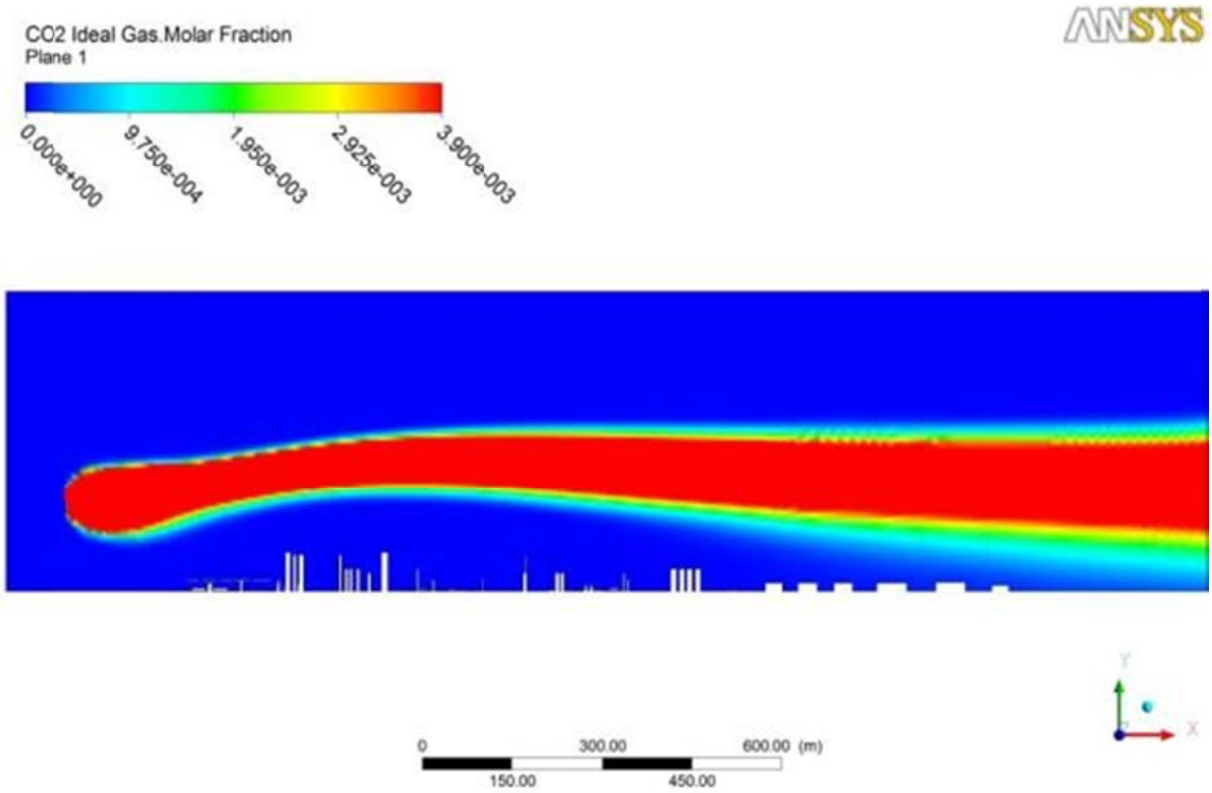


Figura 121: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 26.

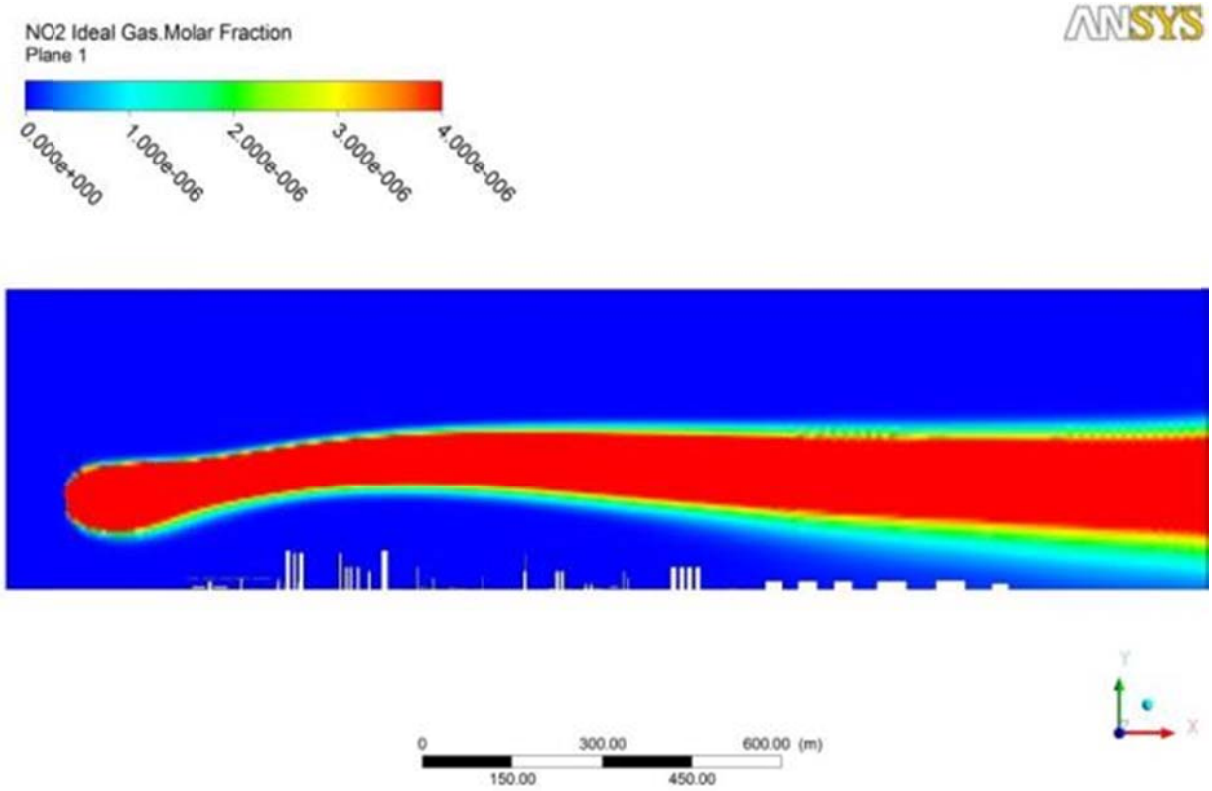


Figura 122: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 26.

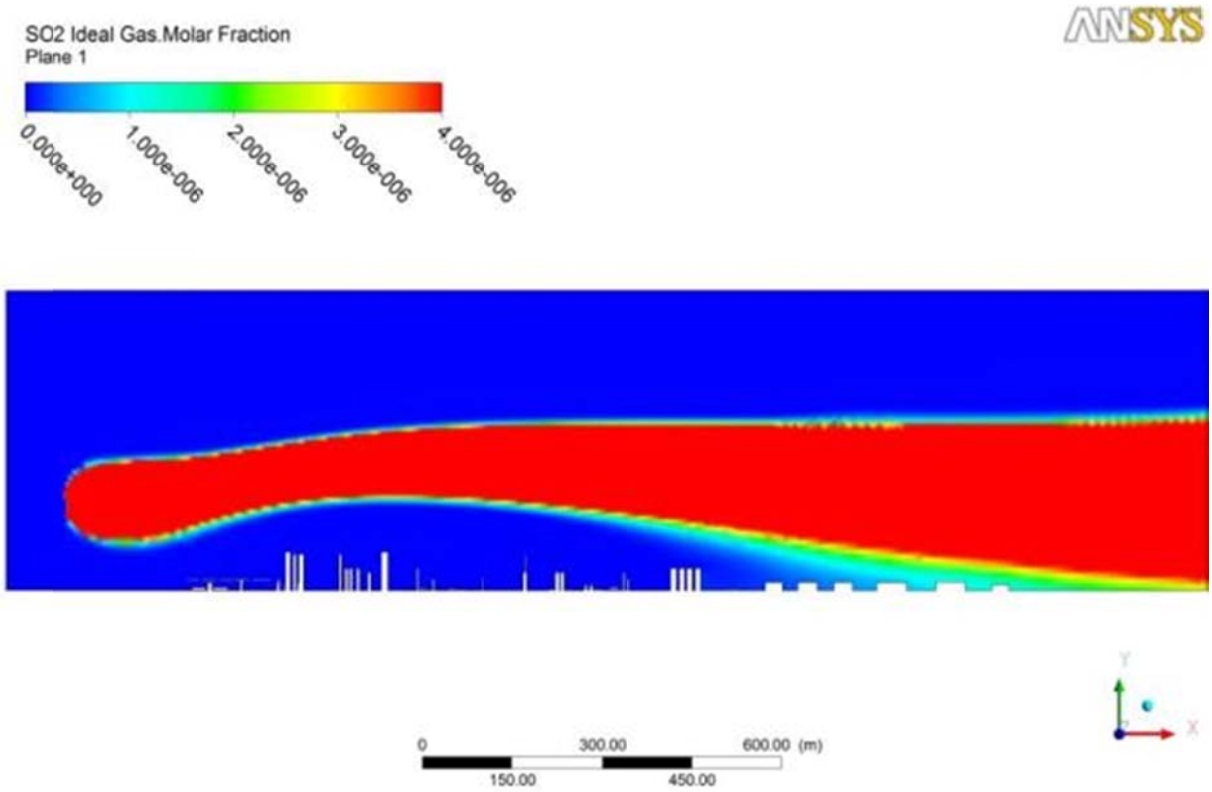


Figura 123: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 26.

5.27 Caso 27

Neste caso foi considerada atmosfera estável (classe F), vento de referência 3 m/s, vazão normal de operação do *flare* (156 kg/s) e ocorrência de inversão térmica.

Este caso é semelhante ao Caso 15, mas com a vazão reduzida para 156 kg/s, e apresenta pluma com as mesmas características deste e do Caso 26, retilínea e estreita, característica de atmosfera estável conforme Figura 12. Ao se comparar o perfil de velocidades na saída do domínio para este caso (ver Figura 124) com a Figura 28, verifica-se que a pluma praticamente admite a velocidade do vento.

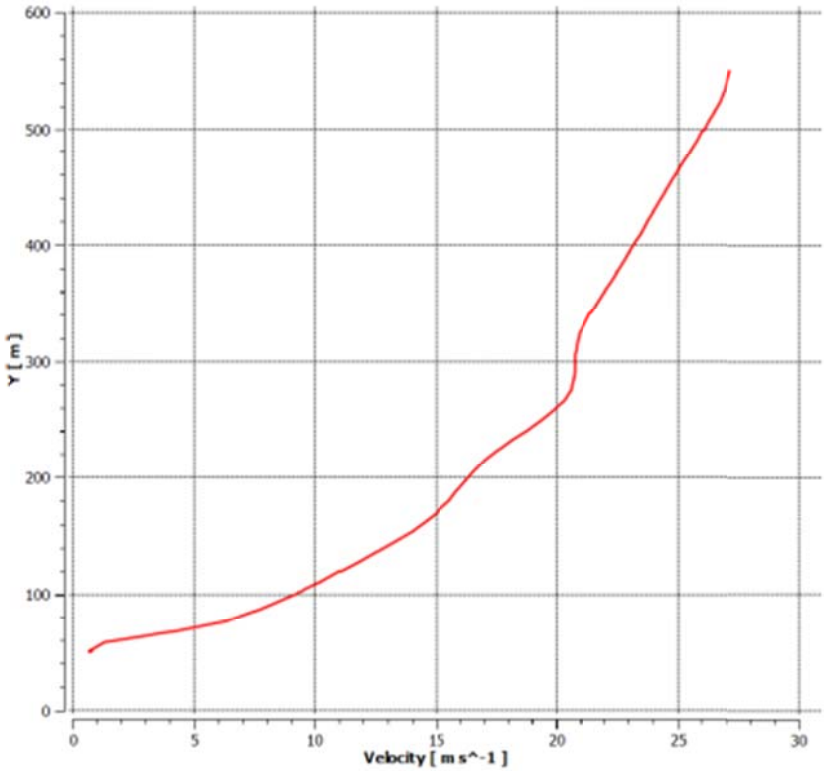


Figura 124: Pefil de velocidades na saída do domínio no Caso 27.

Dentro do domínio considerado no estudo, os limites de tolerância não foram atingidos na proximidade do solo, exceto para o SO_2, porém com a tendência da pluma em descer como descrito nos casos anteriores.

A seguir estão as Figuras 125, 126 e 127 com os perfis de concentração dos poluentes CO_2, NO_2 e SO_2 para o Caso 27.

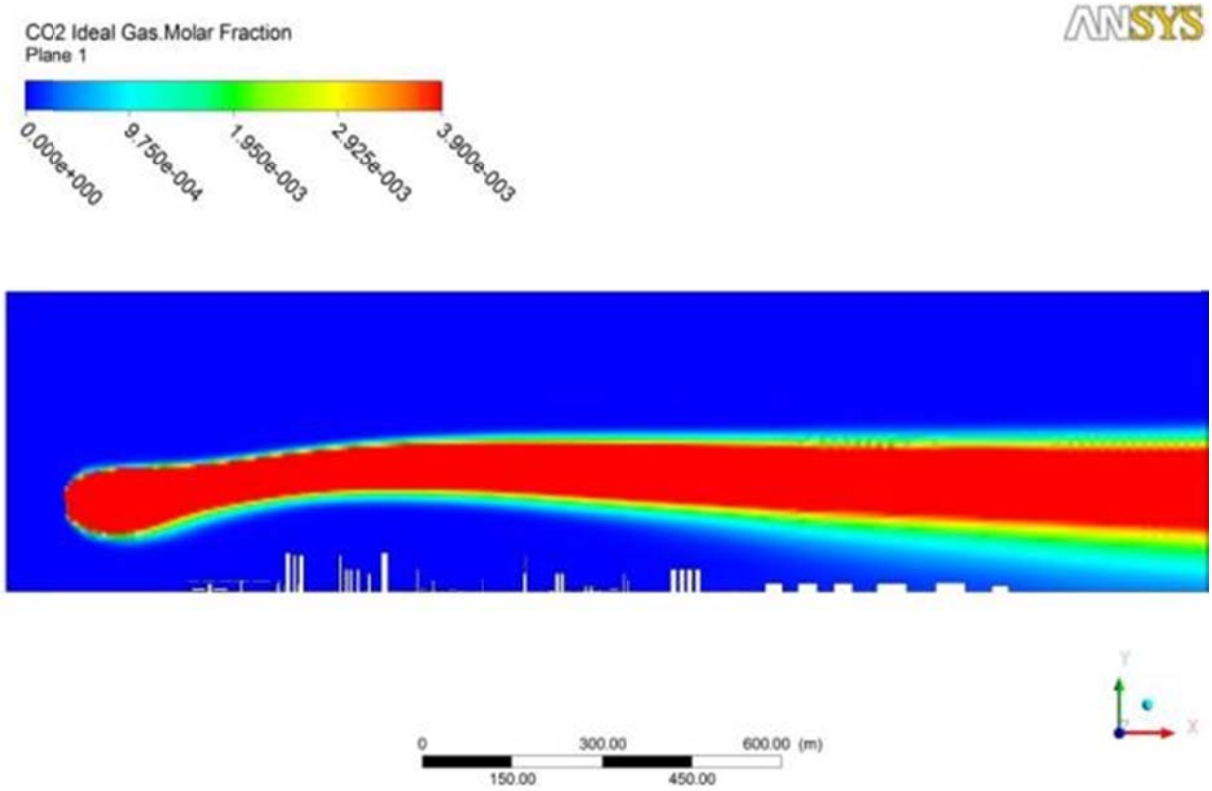


Figura 125: Perfil de concentração do CO_2 no Caso 27.

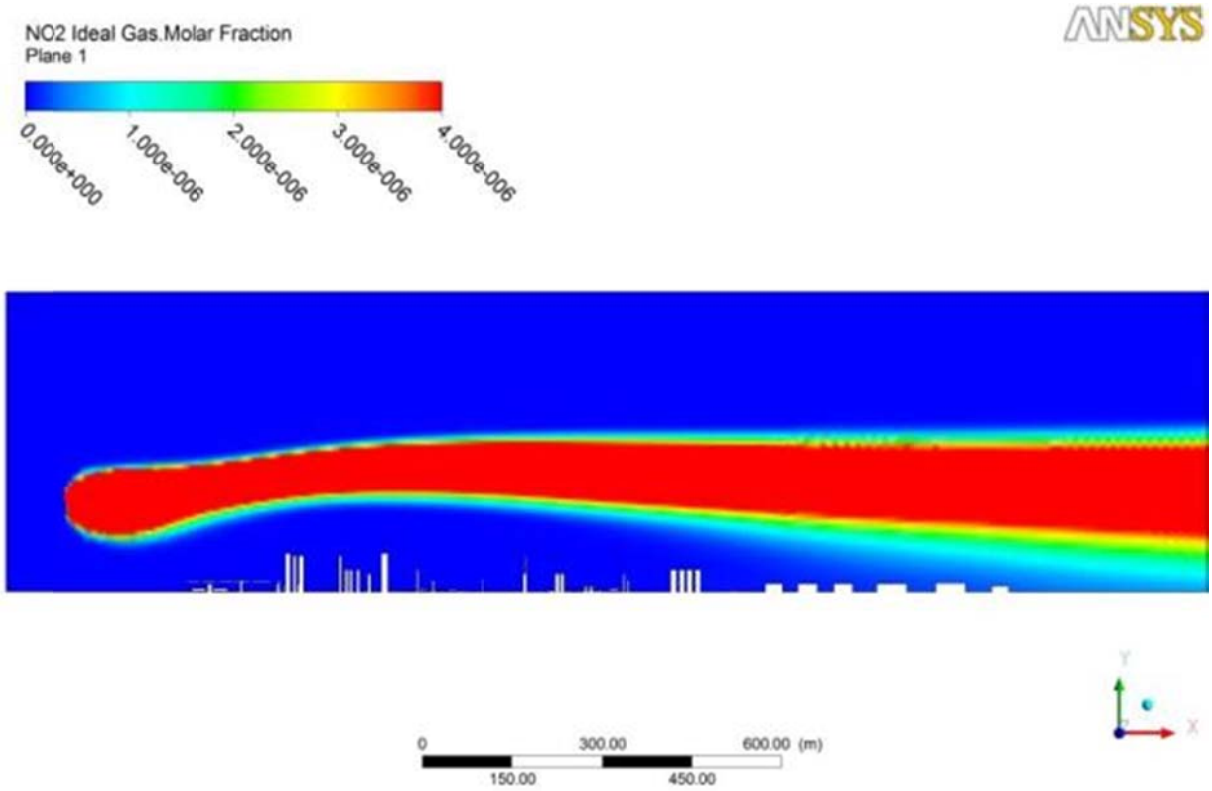


Figura 126: Perfil de concentração do NO_2 no Caso 27.

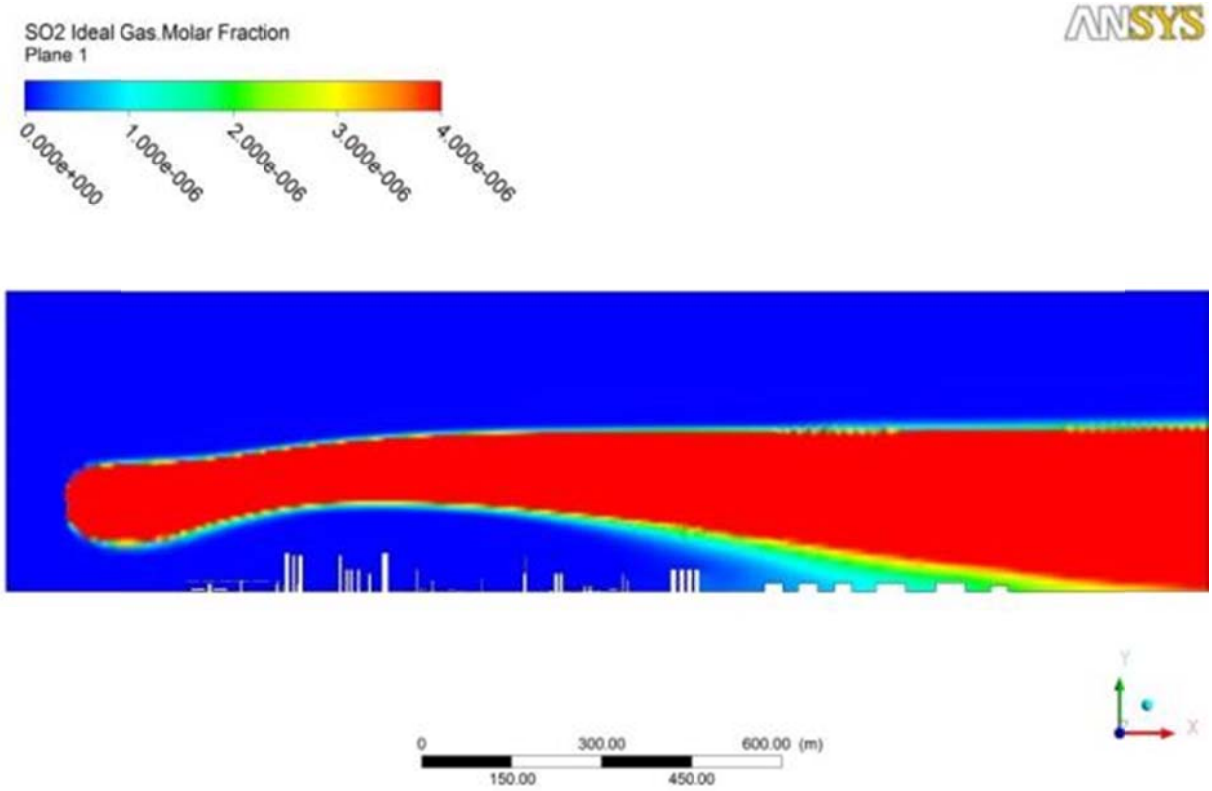


Figura 127: Perfil de concentração do SO_2 no Caso 27.

Nas próximas simulações serão apresentados o estudo dos casos de falha na chama do *flare*, liberando os gases sem a devida queima e possivelmente gerando nuvem inflamável, que em contato com fontes de ignição podem levar a um incêndio em nuvem. Foram selecionados os seguintes gases para análise de concentração na pluma conforme respectivos limites de inflamabilidade (ver Tabela 25): CH_4, C_3H_8 e C_7H_{16}. Foram avaliadas também as concentrações de NH_3 e H_2S com relação aos seus respectivos limites de tolerância quanto à toxicidade (ver Tabela 4).

5.28 Caso 28

Neste caso foi considerada atmosfera instável (classes A/B), vento de referência de 3 m/s, condição de falha na chama do *flare* e vazão normal de projeto (Ma=0,2, 156 kg/s) e sem ocorrência de inversão térmica.

A seguir estão as Figuras 128, 129, 130, 131 e 132 com os perfis de concentração dos gases inflamáveis CH_4, C_3H_8 e C_7H_{16} e gases tóxicos NH_3 e H_2S para o Caso 28. O valor máximo das escalas de concentração mostradas nas figuras representa o limite inferior de inflamabilidade (LFL) para cada componente da pluma e limite de tolerância conforme NR-15.

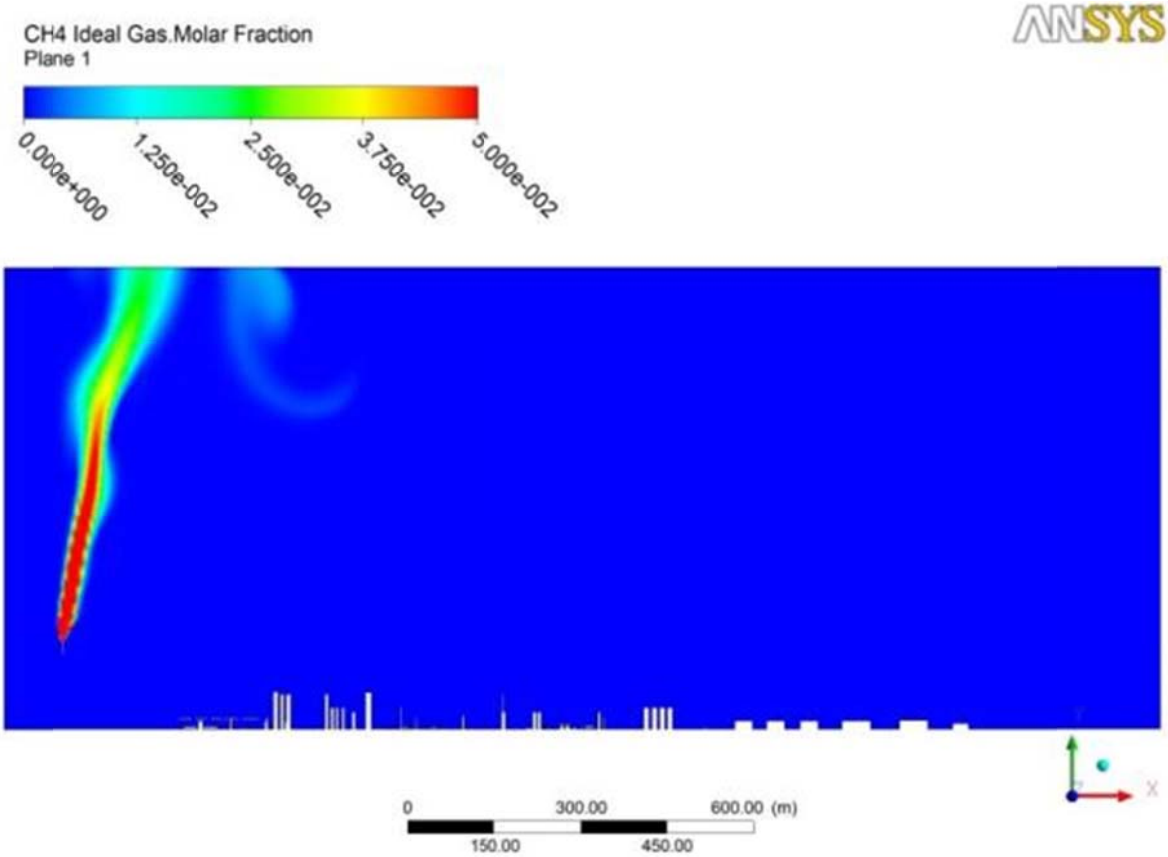


Figura 128: Perfil de concentração do CH_4 no Caso 28.

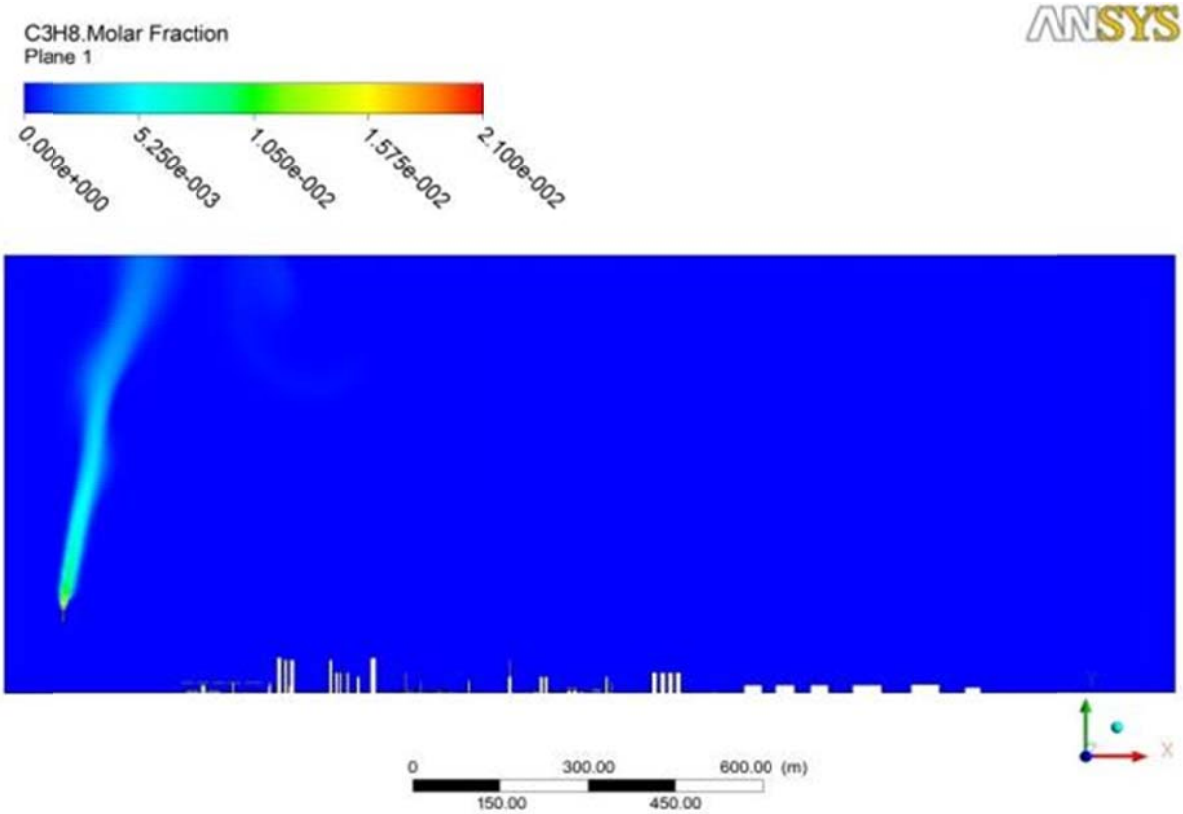


Figura 129: Perfil de concentração do C_3H_8 no Caso 28.

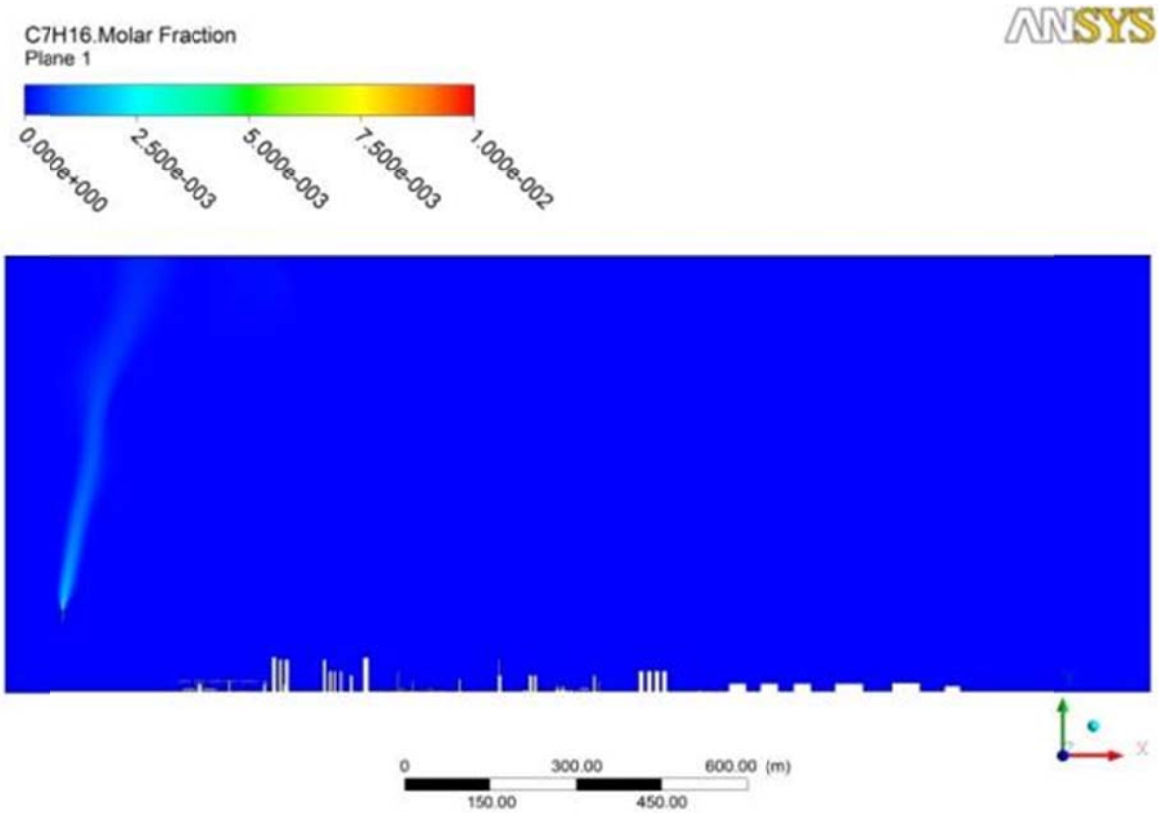


Figura 130: Perfil de concentração do C_7H_{16} no Caso 28.

Conforme esperado para essa classe de estabilidade a pluma assumiu comportamento verticalizado, pelas mesmas razões expostas no Caso 16, não atingindo concentrações mensuráveis dos compostos avaliados ao longo da região de interesse.

Verifica-se que para atmosfera instável, não há presença de nuvem inflamável ou tóxica ao nível do solo.

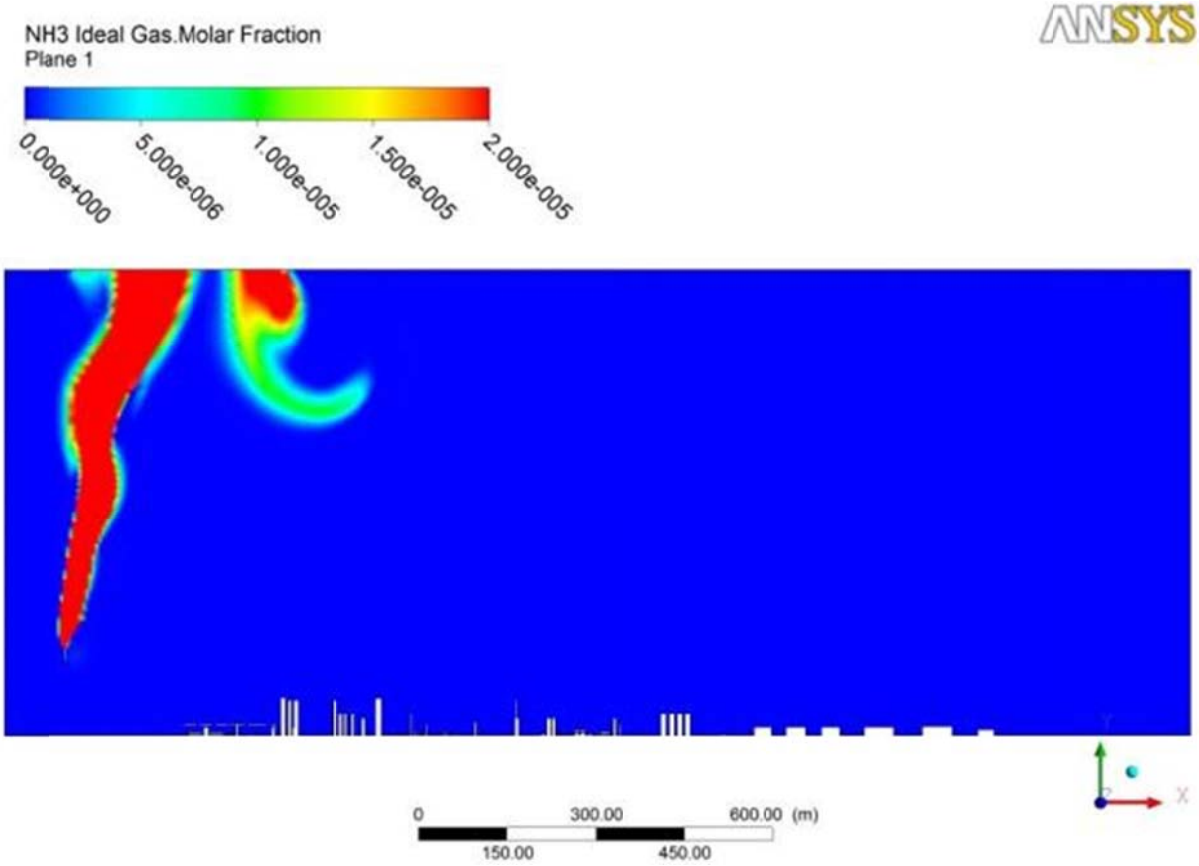


Figura 131: Perfil de concentração do NH_3 no Caso 28.

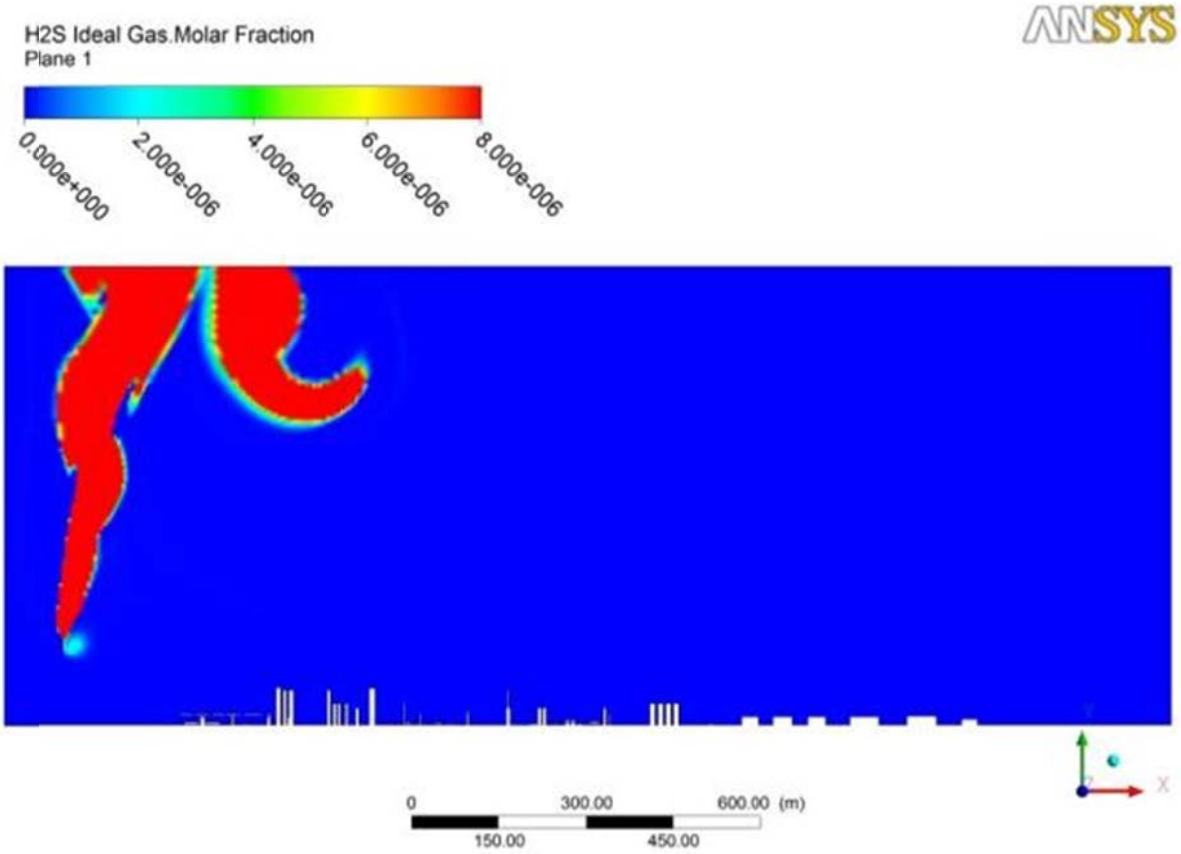


Figura 132: Perfil de concentração do H_2S no Caso 28.

5.29 Caso 29

Neste caso foi considerada atmosfera instável (classes A/B), vento de referência de 3 m/s, vazão máxima de projeto do *flare* (389 kg/s), sem a ocorrência de inversão térmica e durante falha da chama.

Assim como mostrado nos Casos 2, 16 e 28, não foram atingidas concentrações superiores aos seus limites permissíveis, tanto toxicológicos como de inflamabilidade.

A seguir estão as Figuras 133, 134, 135, 136 e 137 com os perfis de concentração dos gases inflamáveis CH_4, C_3H_8 e C_7H_{16} e gases tóxicos NH_3 e H_2S para o Caso 29.

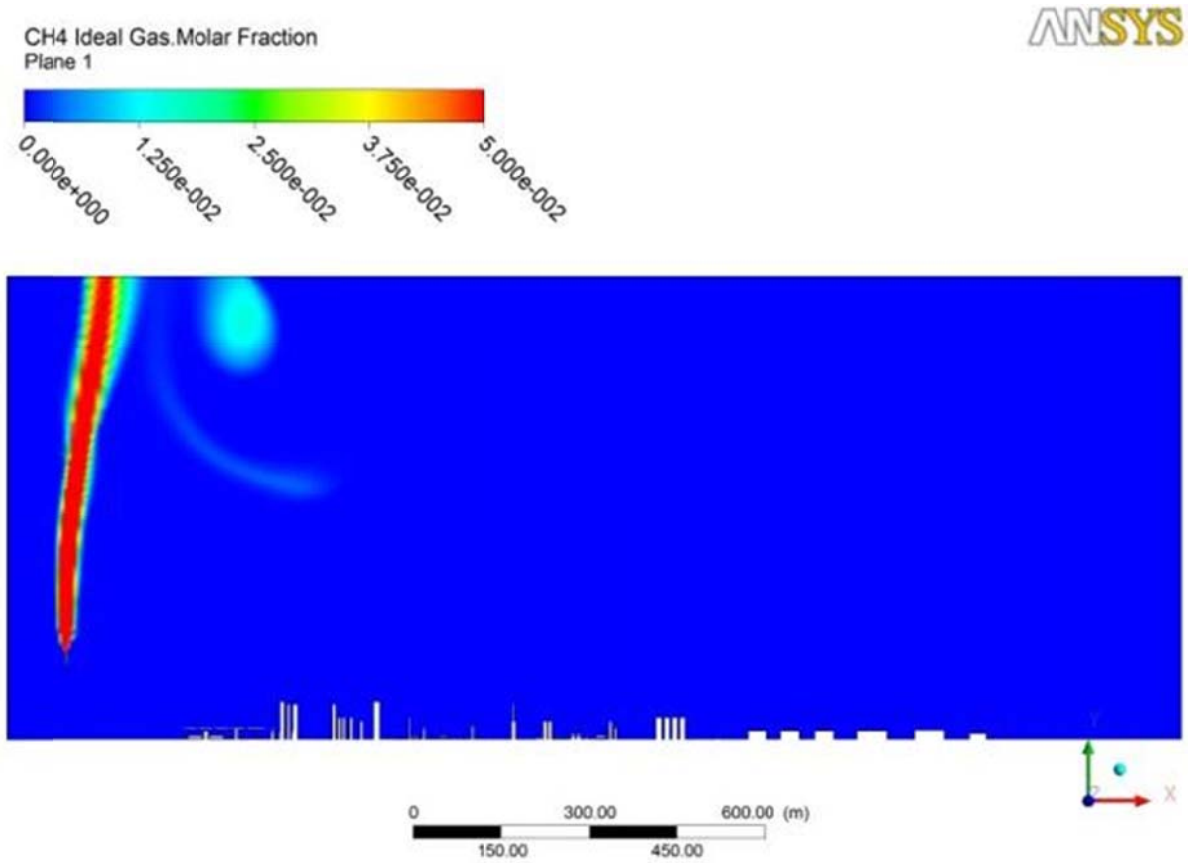


Figura 133: Perfil de concentração do CH_4 no Caso 29.

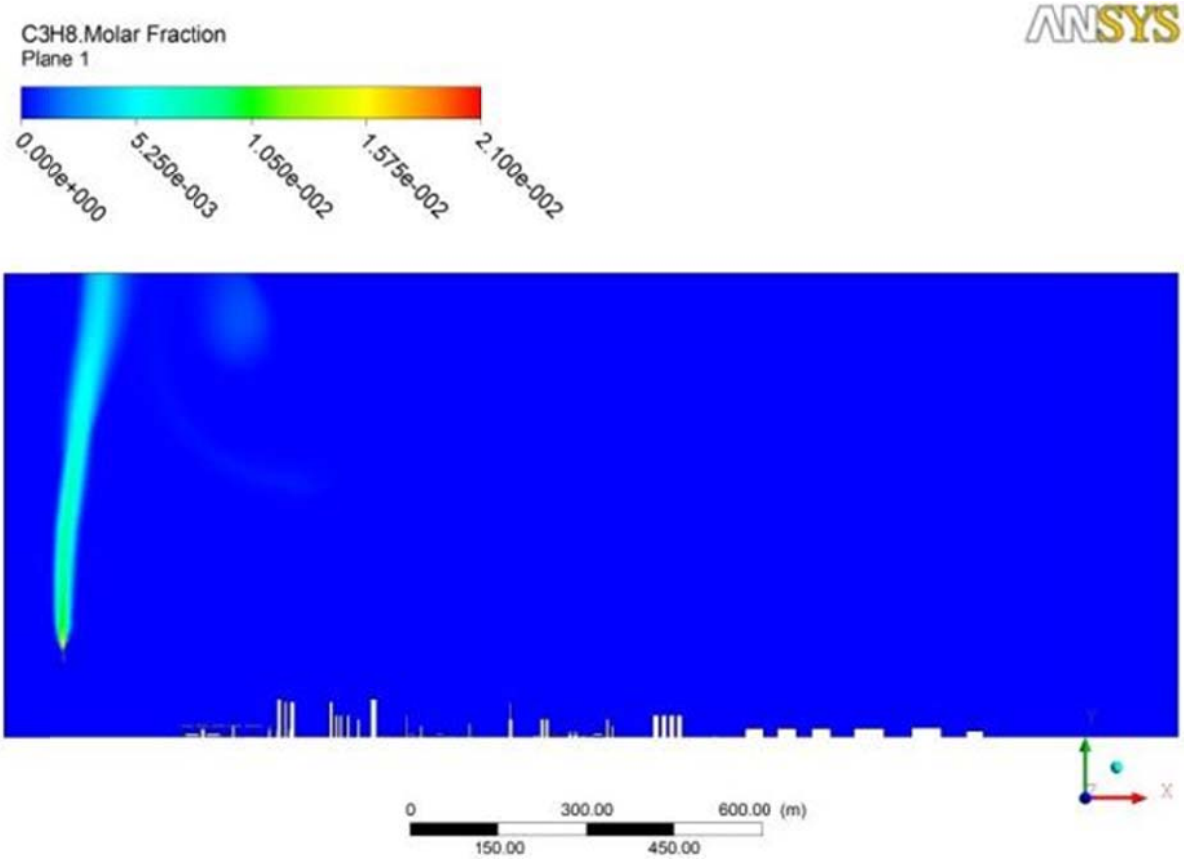


Figura 134: Perfil de concentração do C_3H_8 no Caso 29.

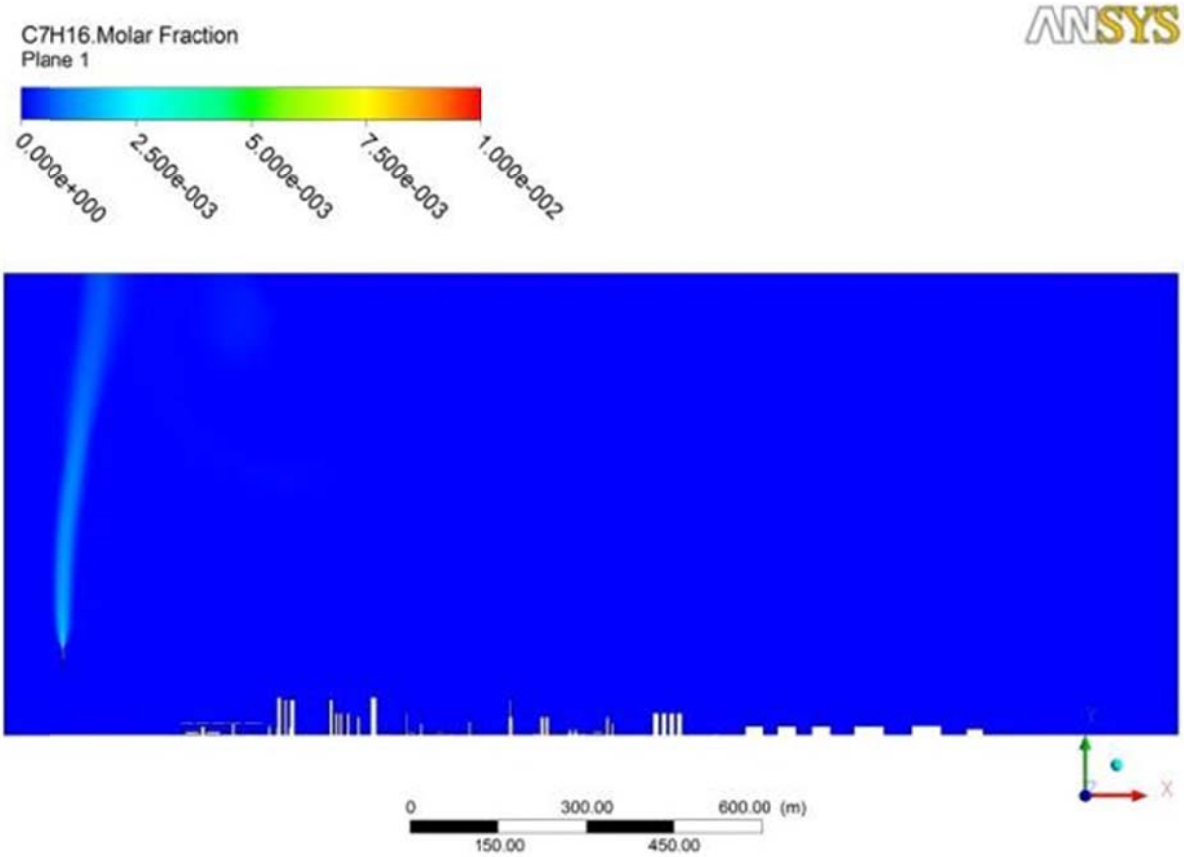


Figura 135: Perfil de concentração do C_7H_{16} no Caso 29.

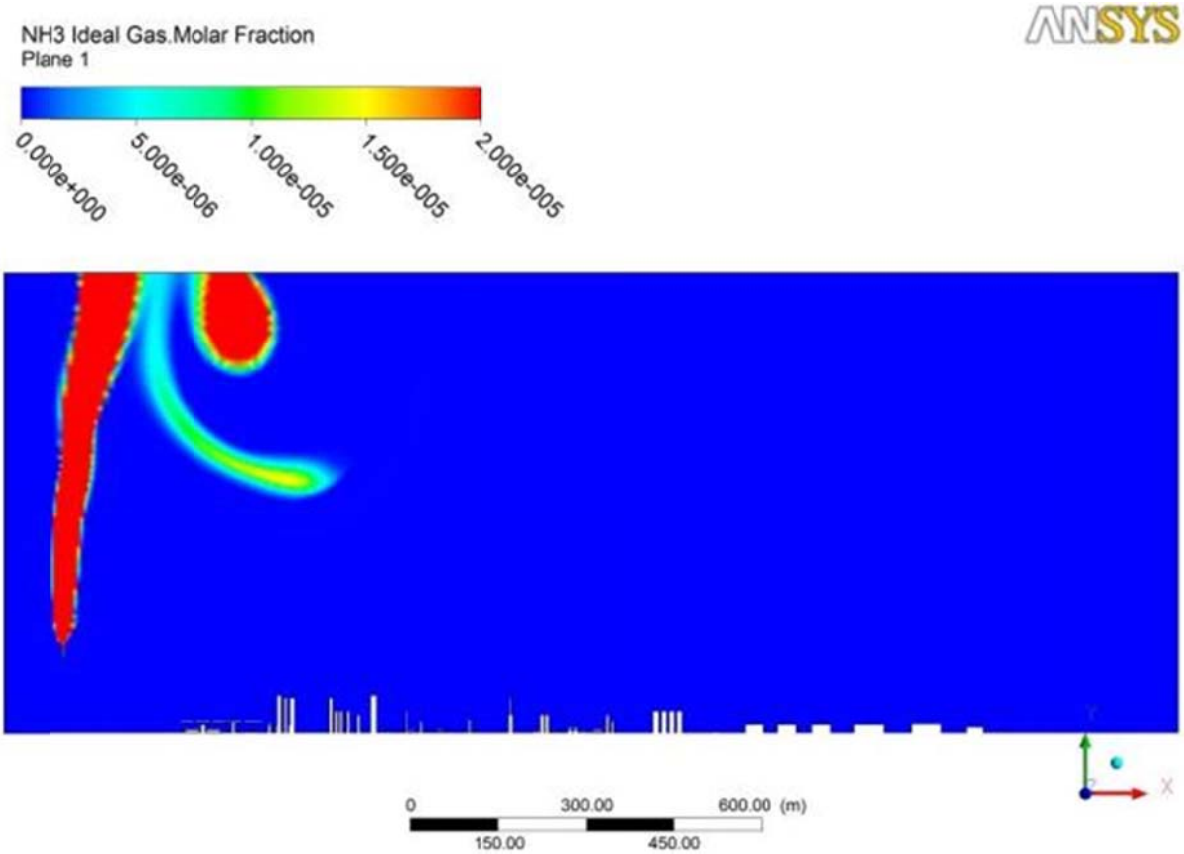


Figura 136: Perfil de concentração do NH_3 no Caso 29.

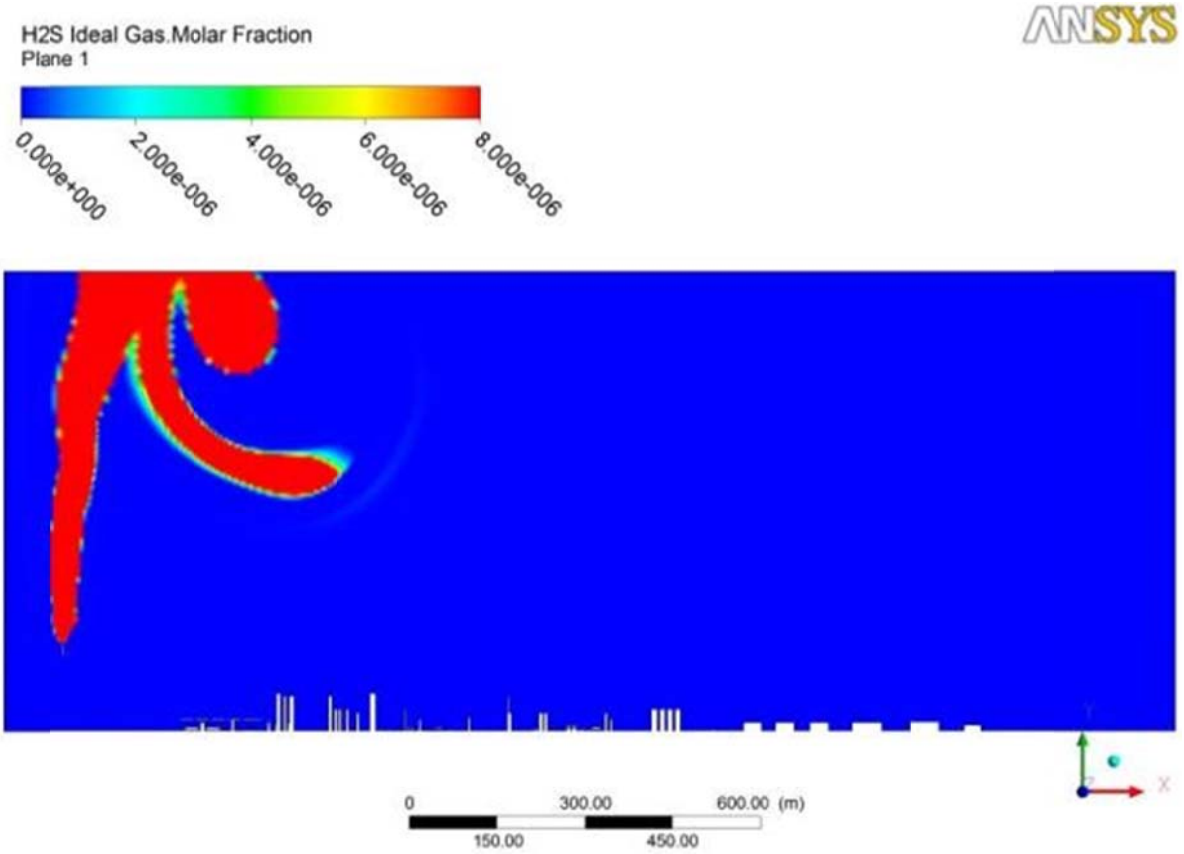


Figura 137: Perfil de concentração do H_2S no Caso 29.

5.30 Caso 30

Neste caso foi considerada atmosfera neutra (classe D), vento de referência de 5 m/s, vazão normal de projeto do *flare* (Ma=0,2), sem a ocorrência de inversão térmica e durante falha da chama.

Em comparação com o Caso 19, que considera as mesmas condições atmosféricas, porém com condição normal de operação da tocha (com queima dos gases), as plumas apresentam o mesmo formato.

Ao se comparar com o Caso 7, que contém as mesmas características atmosféricas, no entanto, com condição de queima dos gases e vazão máxima de projeto do *flare*, também se verifica o mesmo formato para a pluma.

Com relação ao Caso 24, em que se têm as mesmas classe de estabilidade atmosférica (classe D), velocidade de vento e vazão de emissão, mas considerando a queima dos gases durante a ocorrência de inversão térmica, verifica-se o mesmo perfil de pluma e o solo é atingido por nuvem com concentrações superiores aos limites de tolerância permitidos para os poluentes.

Portanto, nota-se que para classe de estabilidade atmosférica neutra a pluma já apresenta tendência a descer e consequentemente tem maior probabilidade de atingir os limites de tolerância dos poluentes ao nível do solo. O alcance da pluma a baixas altitudes ocorre, com maior probabilidade, a grandes distâncias a partir da fonte de emissão, podendo provavelmente afetar áreas vizinhas à refinaria. Quanto à questão da inflamabilidade, assim como na atmosfera instável (Casos 28 e 29), a classe de estabilidade neutra (D) não apresenta nuvem em concentrações inflamáveis ao nível do solo.

A seguir estão as Figuras 138, 139, 140, 141 e 142 com os perfis de concentração dos gases inflamáveis CH_4, C_3H_8 e C_7H_{16} e gases tóxicos NH_3 e H_2S para o Caso 30.

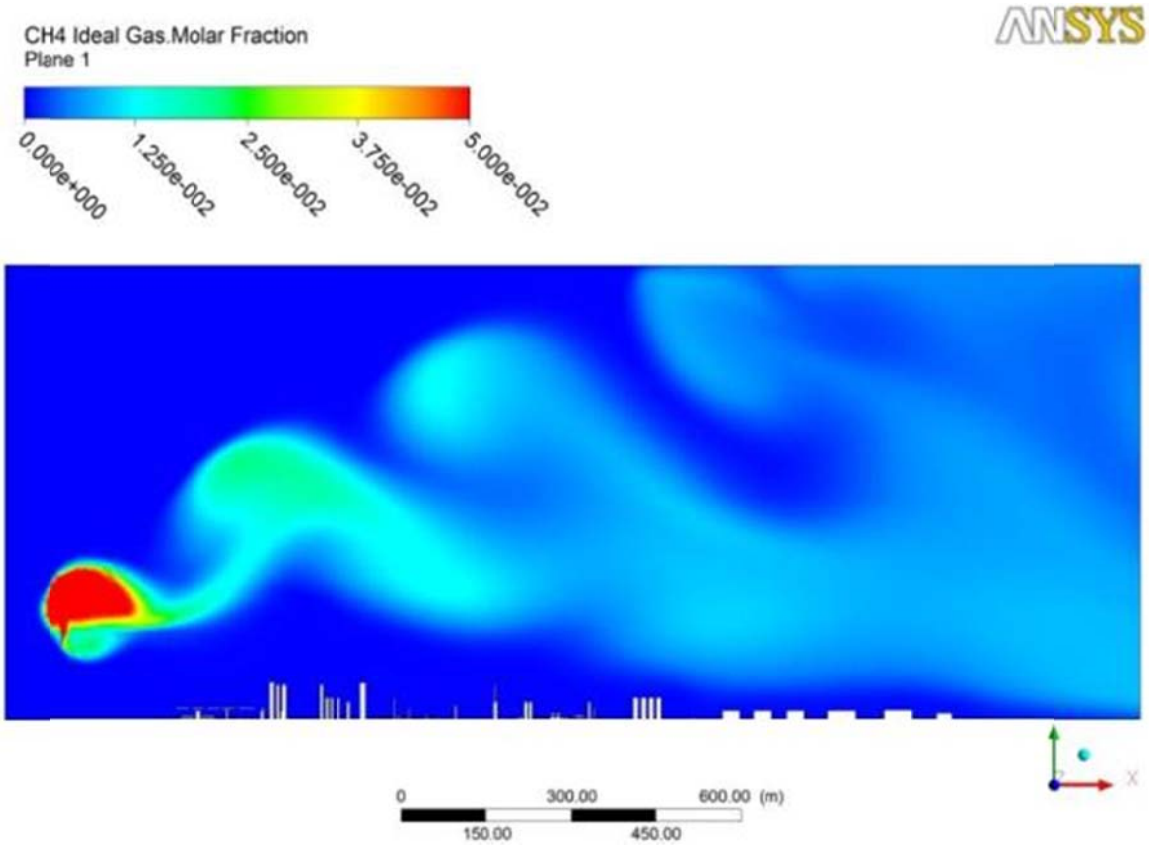


Figura 138: Perfil de concentração do CH_4 no Caso 30.

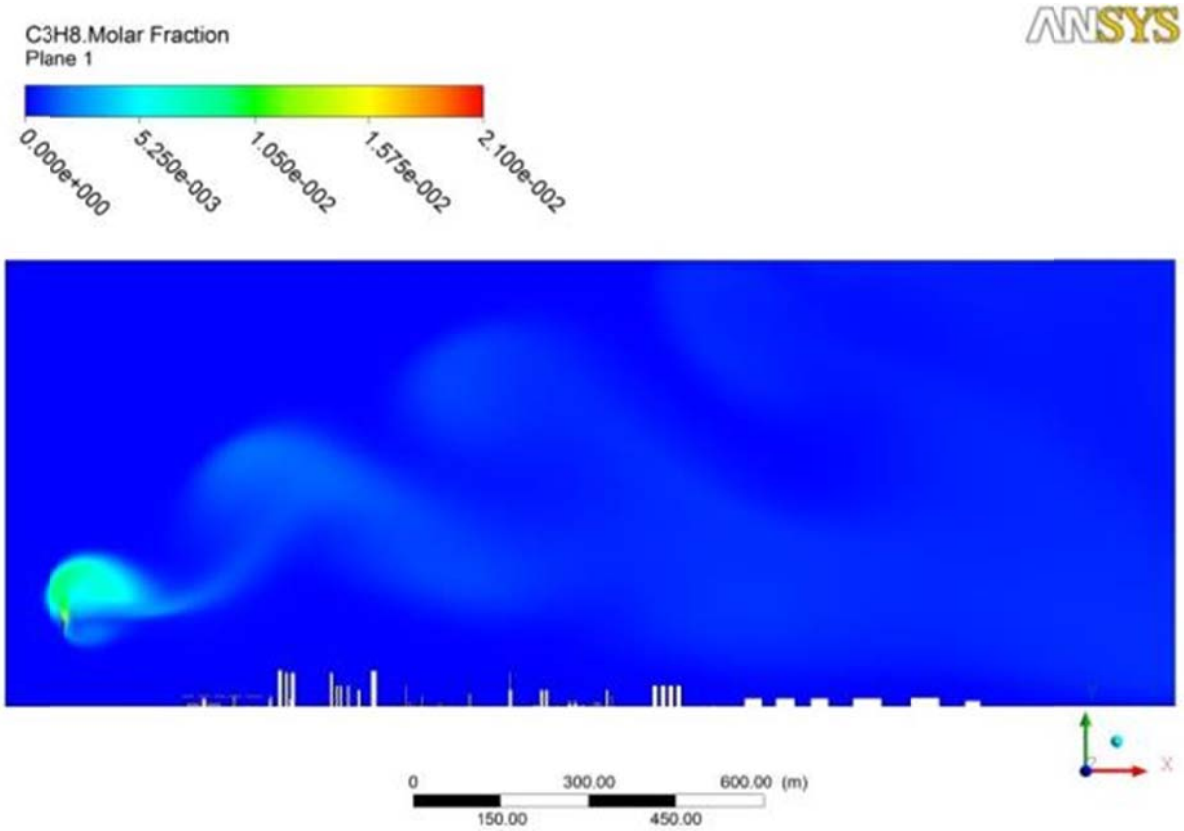


Figura 139: Perfil de concentração do C_3H_8 no Caso 30.

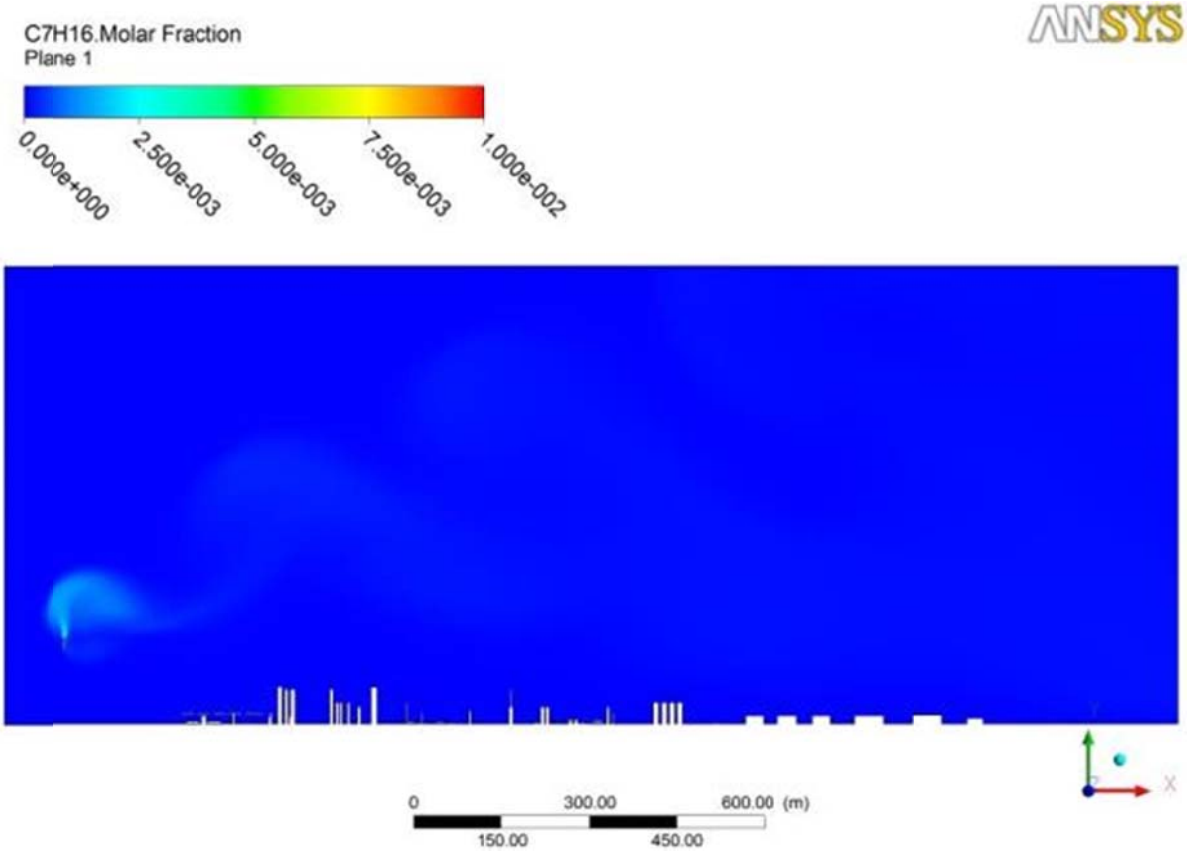


Figura 140: Perfil de concentração do C_7H_{16} no Caso 30.

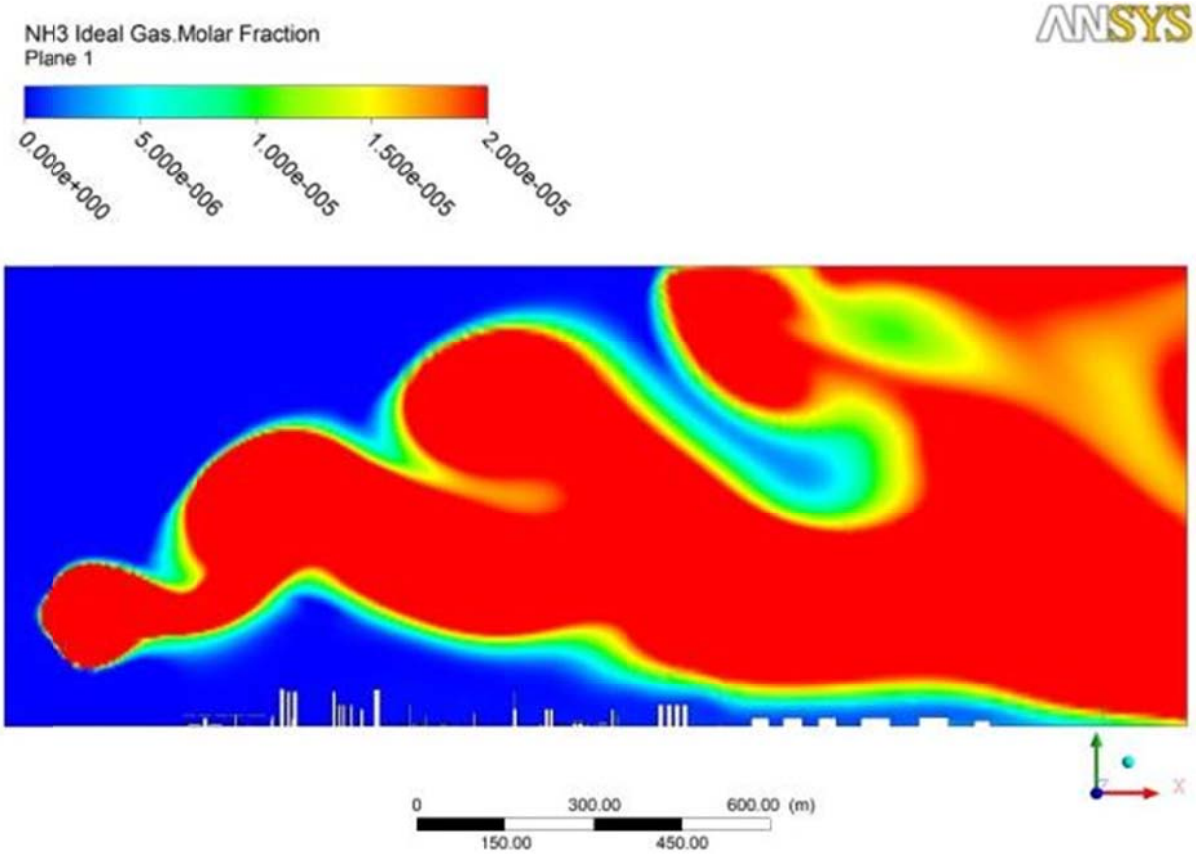


Figura 141: Perfil de concentração do NH_3 no Caso 30.

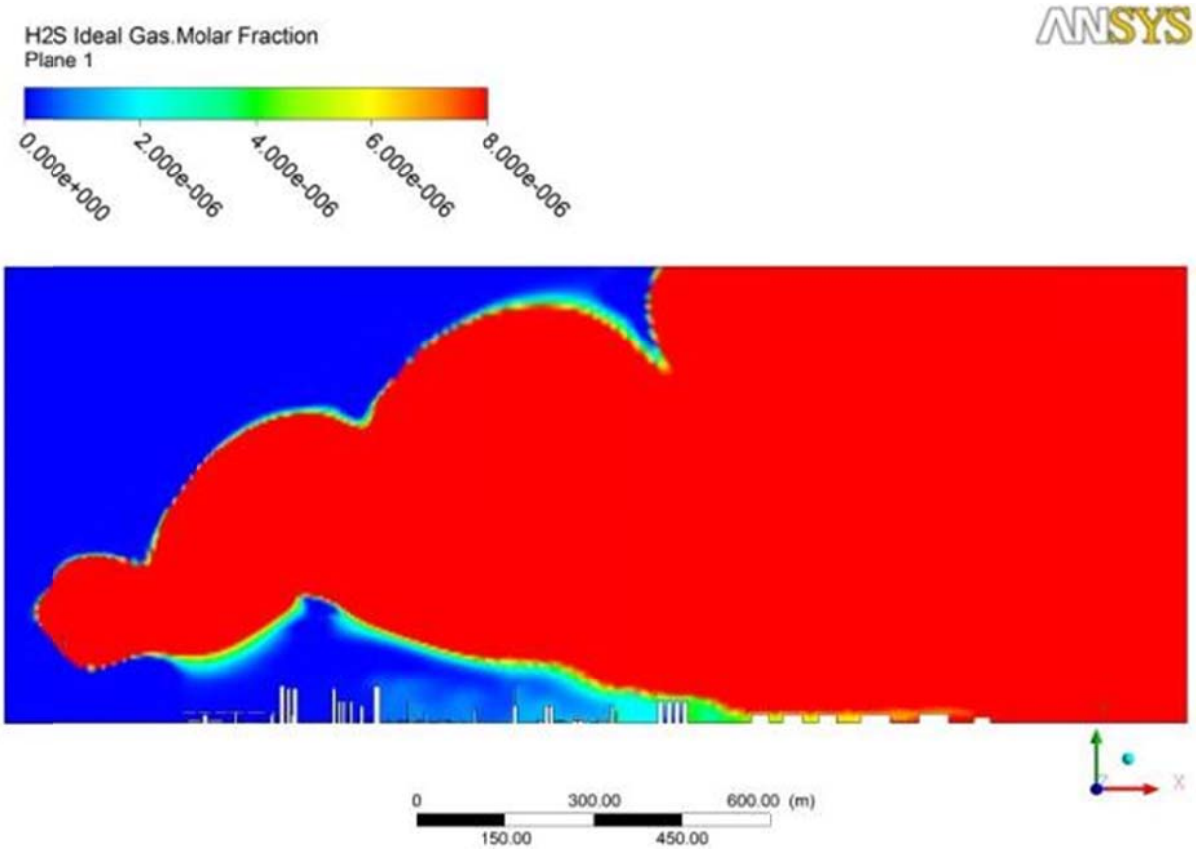


Figura 142: Perfil de concentração do H_2S no Caso 30.

5.31 Caso 31

Este caso contempla o estudo de classe de estabilidade atmosférica neutra, vento de referência de 5 m/s, vazão máxima de projeto do *flare* (Ma=0,5), durante falha da chama e sem a ocorrência de inversão térmica.

Em comparação com o Caso 7, em que as condições atmosféricas e vazão de emissão foram mantidas, apenas alterando a composição, percebe-se que as plumas são muito semelhantes. O mesmo se verifica na comparação com o Caso 30, apenas com a influência da vazão, que neste caso por haver maior quantidade de gases emitidos, são encontrados níveis superiores de concentração dos poluentes.

Com relação à inflamabilidade, confirma-se que a atmosfera neutra (classe D) não apresenta nuvem em concentrações inflamáveis ao nível do solo.

A seguir estão as Figuras 143, 144, 145, 146 e 147 com os perfis de concentração dos gases inflamáveis CH_4, C_3H_8 e C_7H_{16} e gases tóxicos NH_3 e H_2S para o Caso 31.

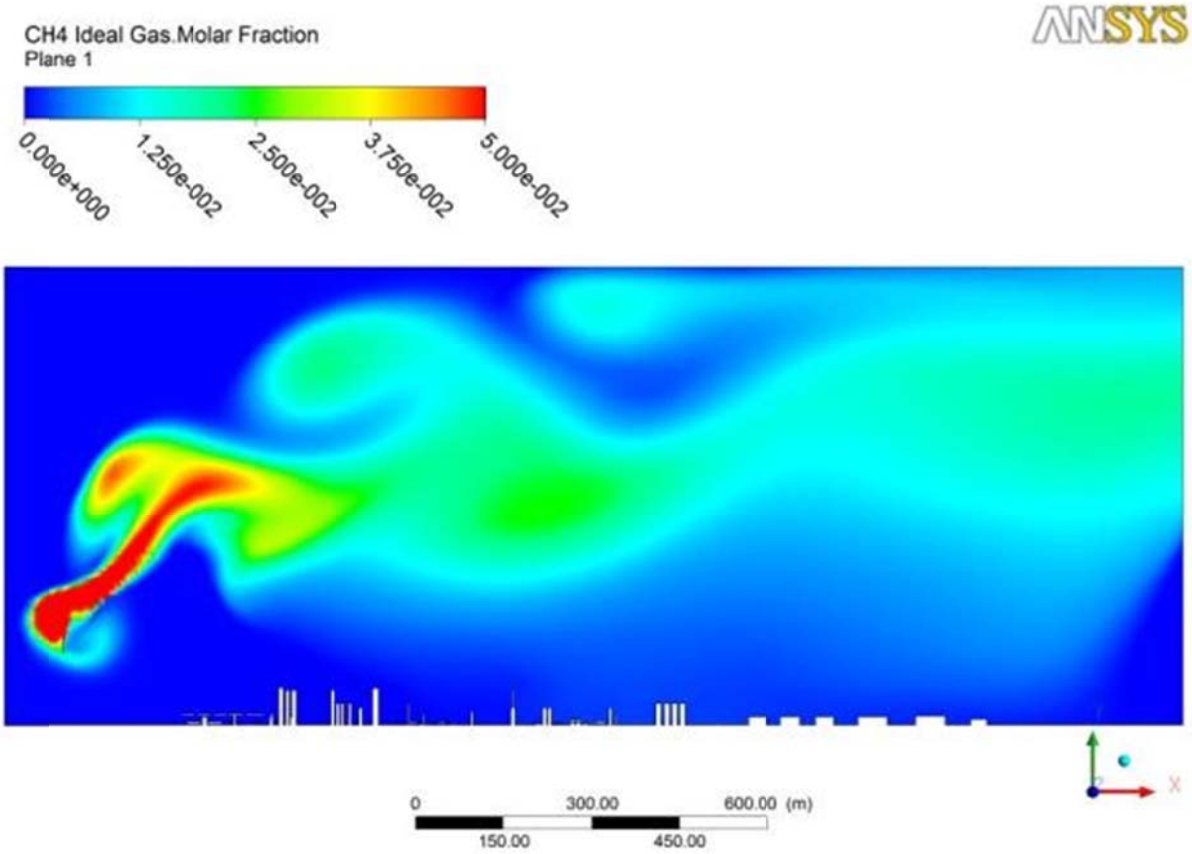


Figura 143: Perfil de concentração do CH_4 no Caso 31.

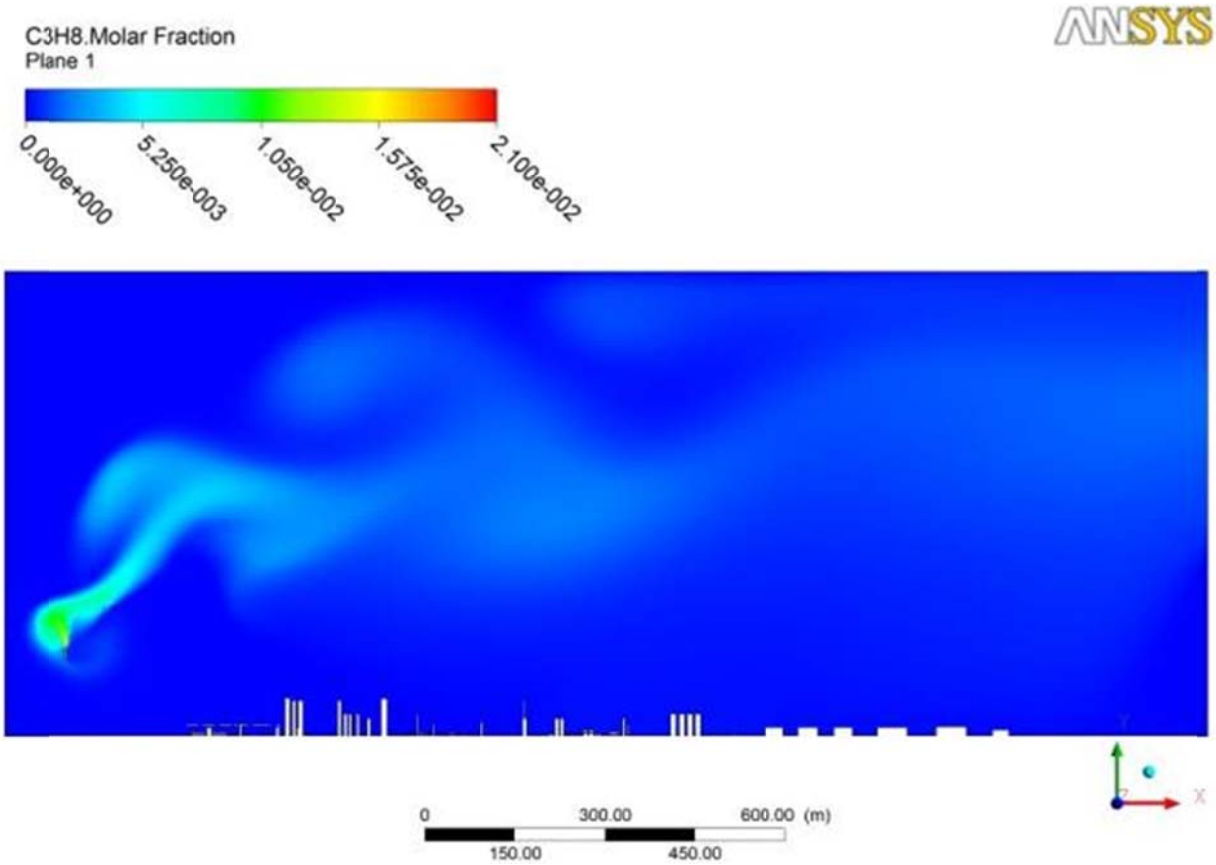


Figura 144: Perfil de concentração do C_3H_8 no Caso 31.

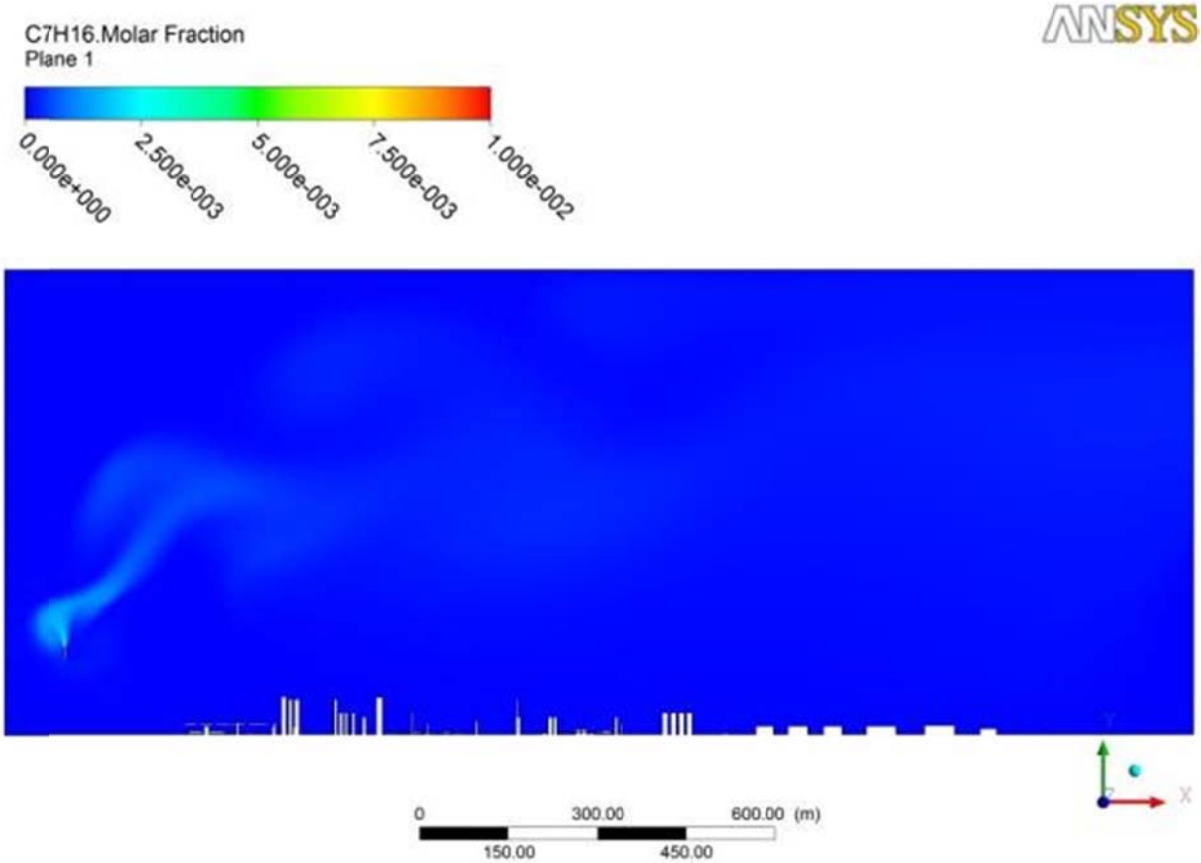


Figura 145: Perfil de concentração do C_7H_{16} no Caso 31.

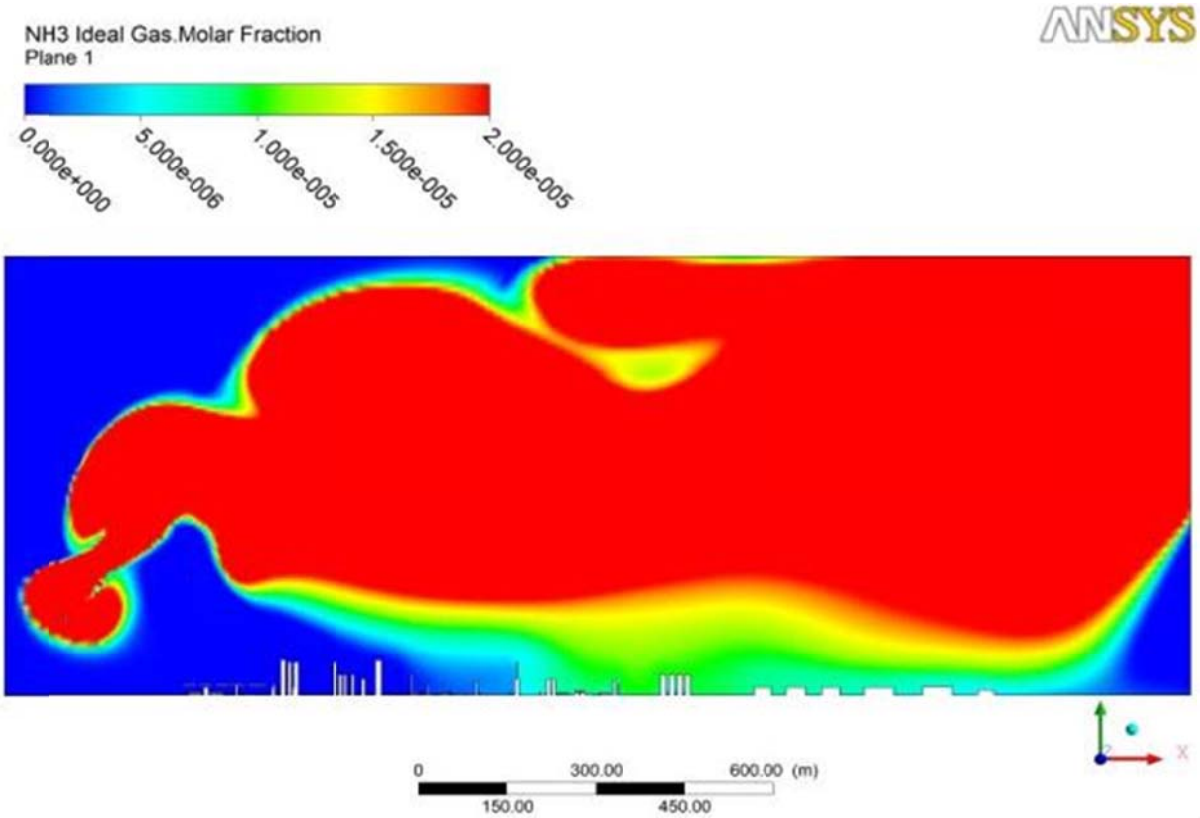


Figura 146: Perfil de concentração do NH_3 no Caso 31.

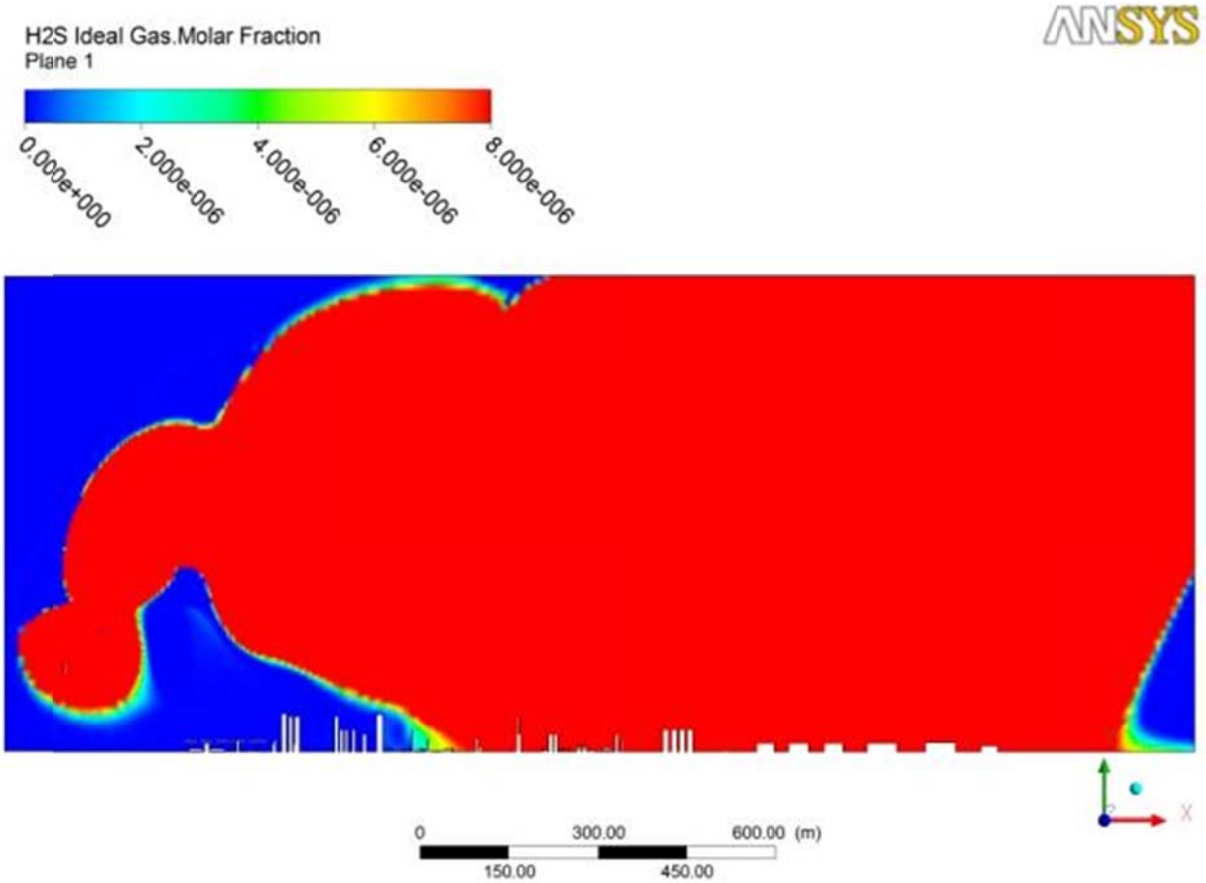


Figura 147: Perfil de concentração do H_2S no Caso 31.

5.32 Caso 32

Neste caso foi considerada atmosfera estável (classe F), vento de referência de 3 m/s, vazão normal de projeto do *flare* (Ma=0,2), durante falha da chama e sem a ocorrência de inversão térmica.

Assim como mostrado nos demais casos de atmosfera estável, a pluma apresentou formato estreito e retilíneo com tendência a atingir o solo com elevadas concentrações a grandes distâncias da fonte de emissão, possivelmente em áreas vizinhas à refinaria. Não foram encontrados ao nível do solo, concentrações consideráveis dos gases inflamáveis.

A seguir estão as Figuras 148, 149, 150, 151 e 152 com os perfis de concentração dos gases inflamáveis CH_4, C_3H_8 e C_7H_{16} e gases tóxicos NH_3 e H_2S para o Caso 32.

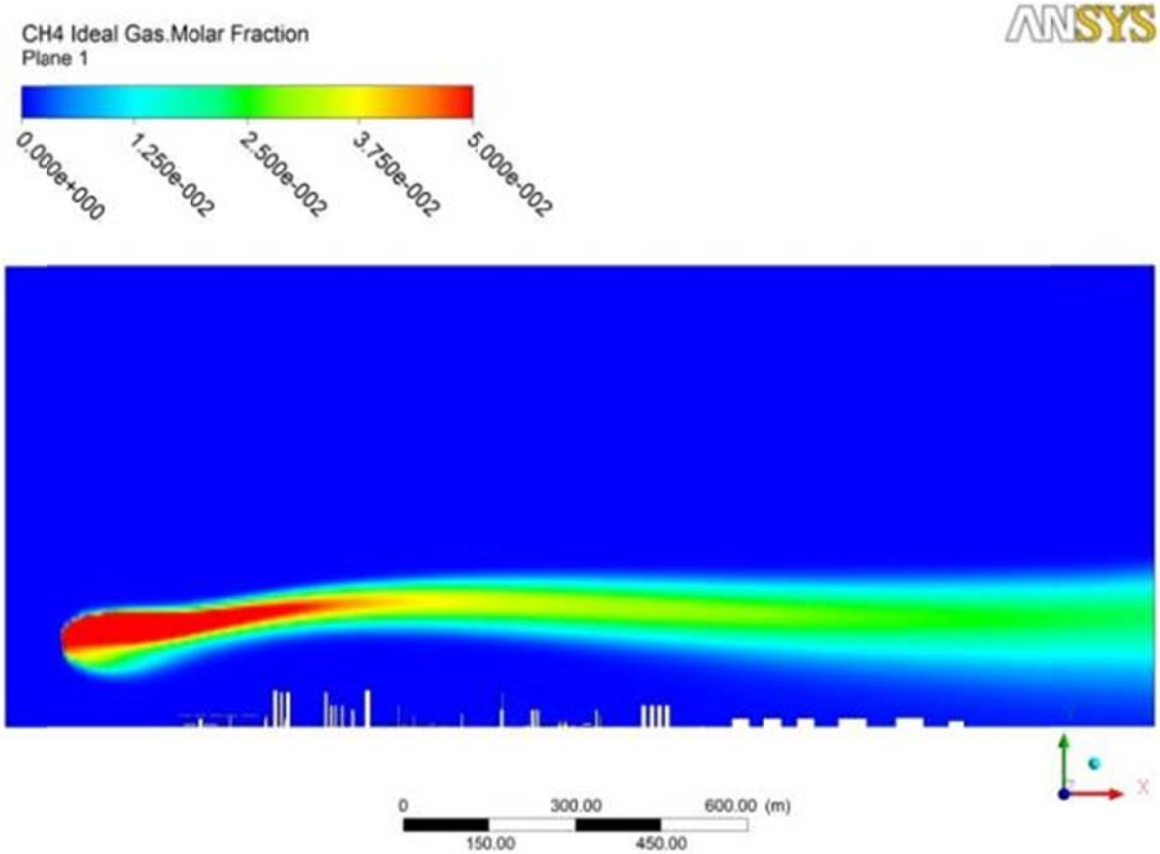


Figura 148: Perfil de concentração do CH_4 no Caso 32.

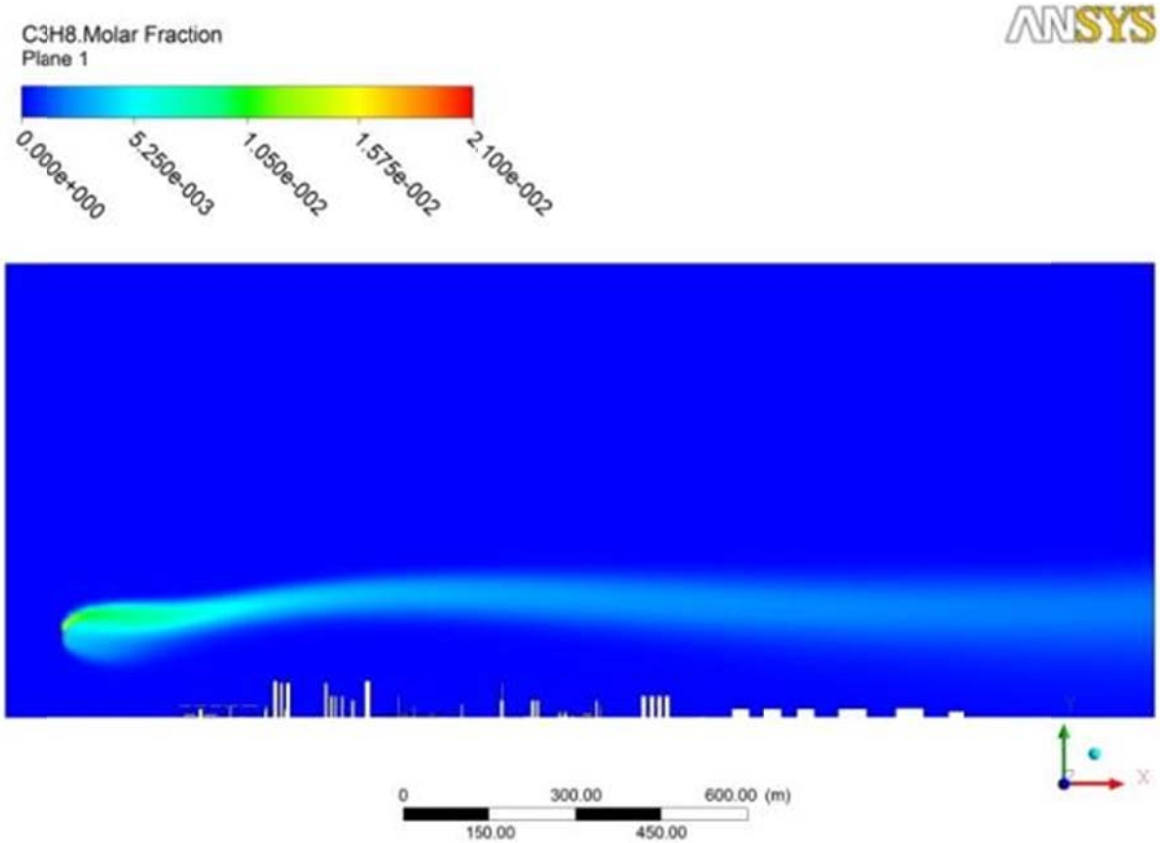


Figura 149: Perfil de concentração do C_3H_8 no Caso 32.

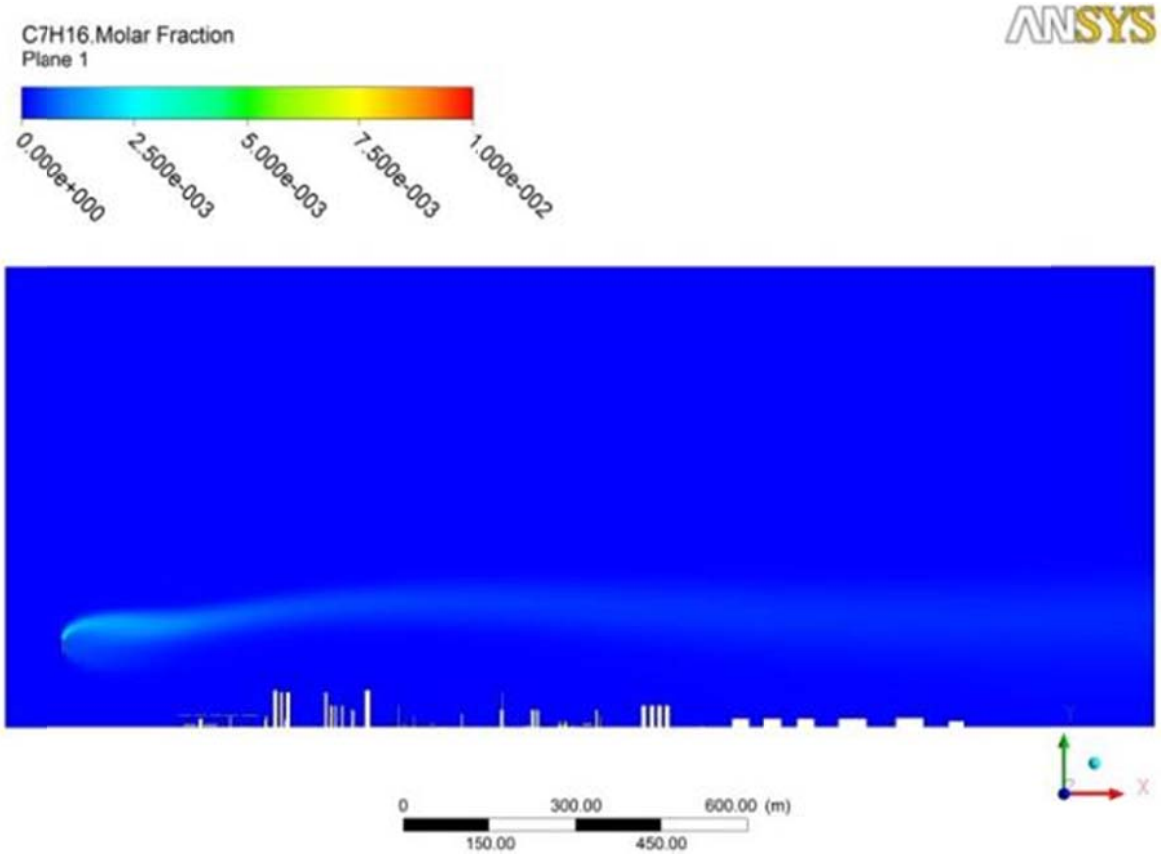


Figura 150: Perfil de concentração do C_7H_{16} no Caso 32.

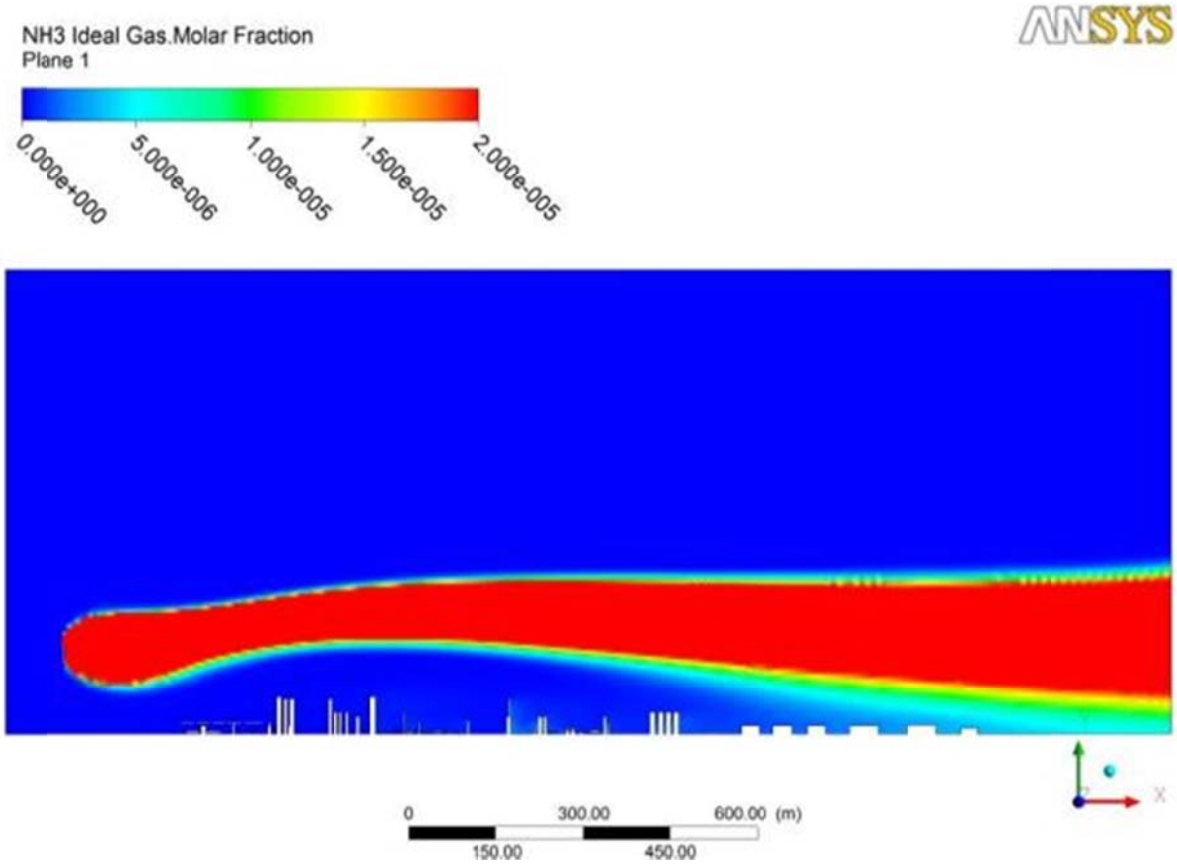


Figura 151: Perfil de concentração do NH_3 no Caso 32.

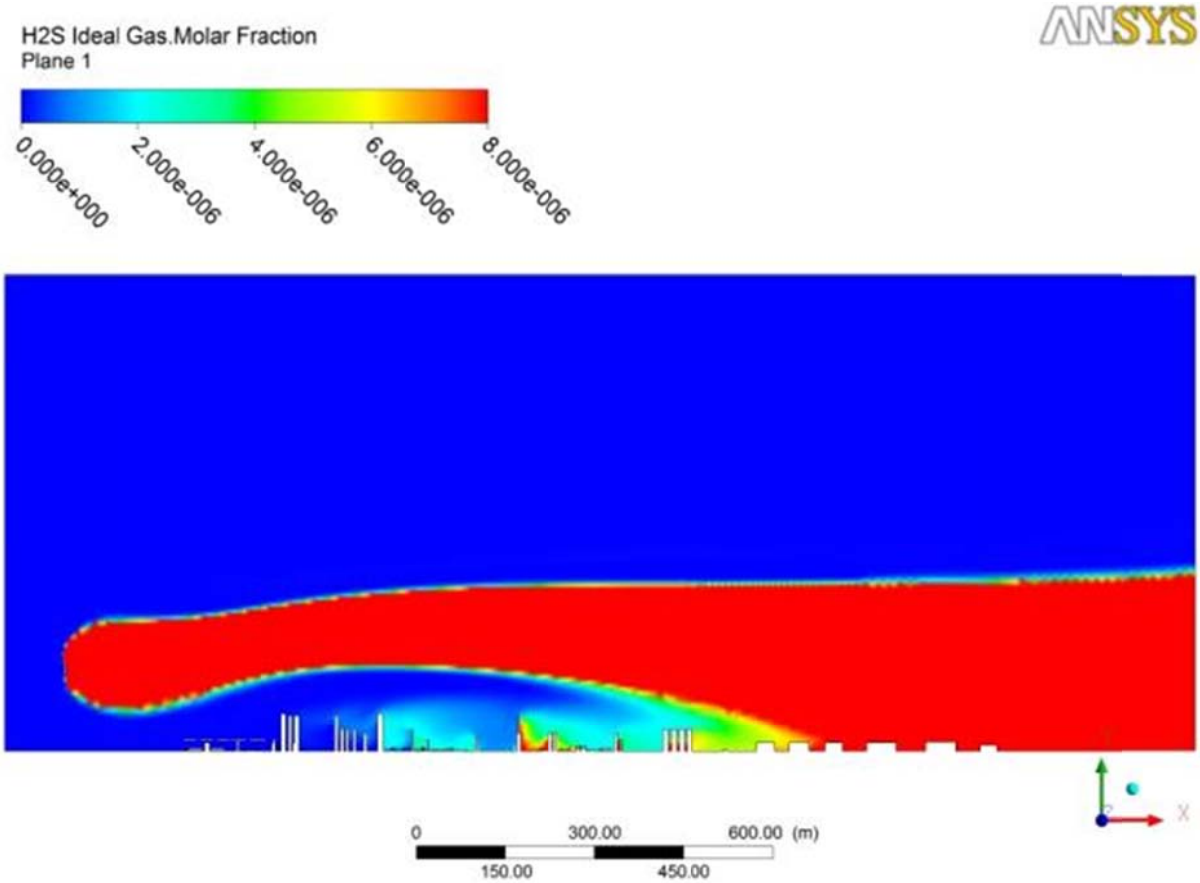


Figura 152: Perfil de concentração do H_2S no Caso 32.

5.33 Caso 33

Neste caso foi considerada atmosfera estável (classe F), vento de referência de 3 m/s, vazão máxima de projeto do *flare* (Ma=0,5), com a ocorrência de inversão térmica e durante falha da chama.

Verifica-se que para atmosfera estável os níveis de tolerância para os gases tóxicos são atingidos no nível do solo a distâncias próximas do *flare*, mas que não há presença de nuvem inflamável a baixas altitudes.

A seguir estão as Figuras 153, 154, 155, 156 e 157 com os perfis de concentração dos gases inflamáveis CH_4, C_3H_8 e C_7H_{16} e gases tóxicos NH_3 e H_2S para o Caso 33.

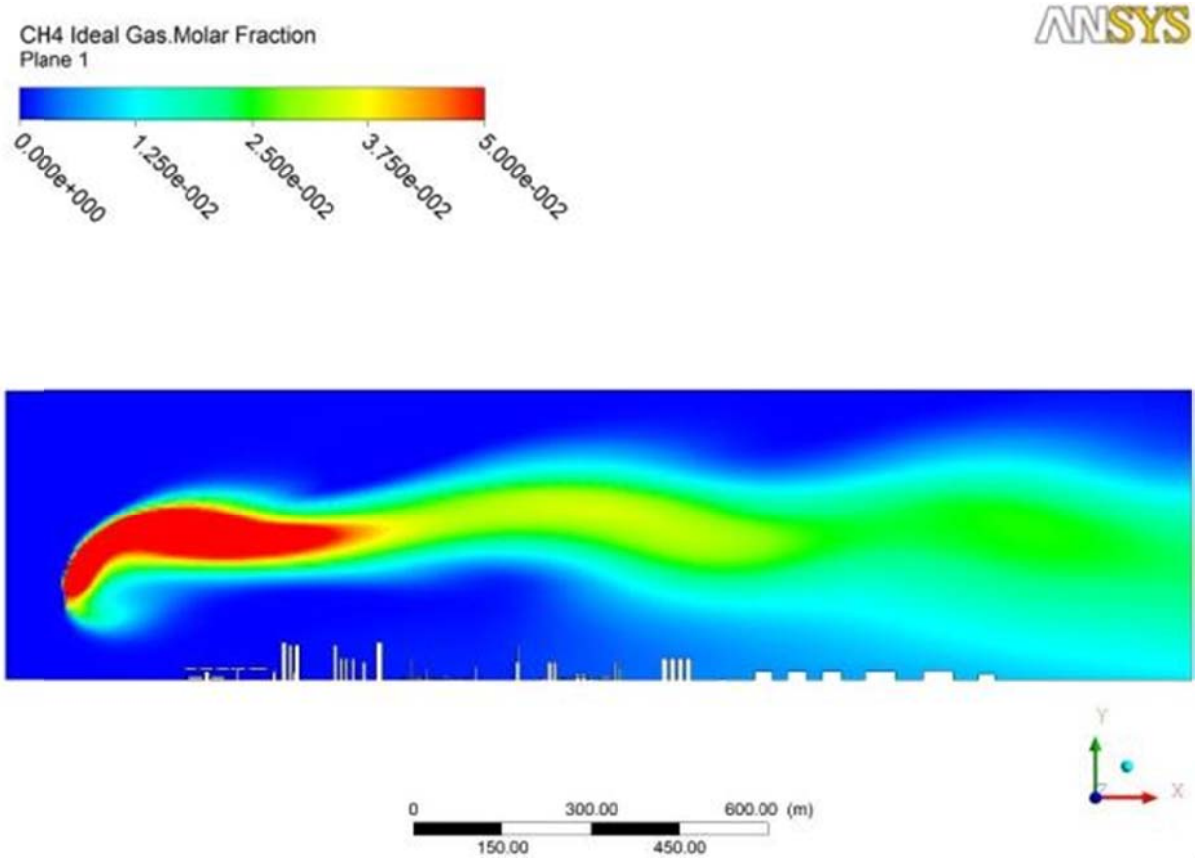


Figura 153: Perfil de concentração do CH_4 no Caso 33.

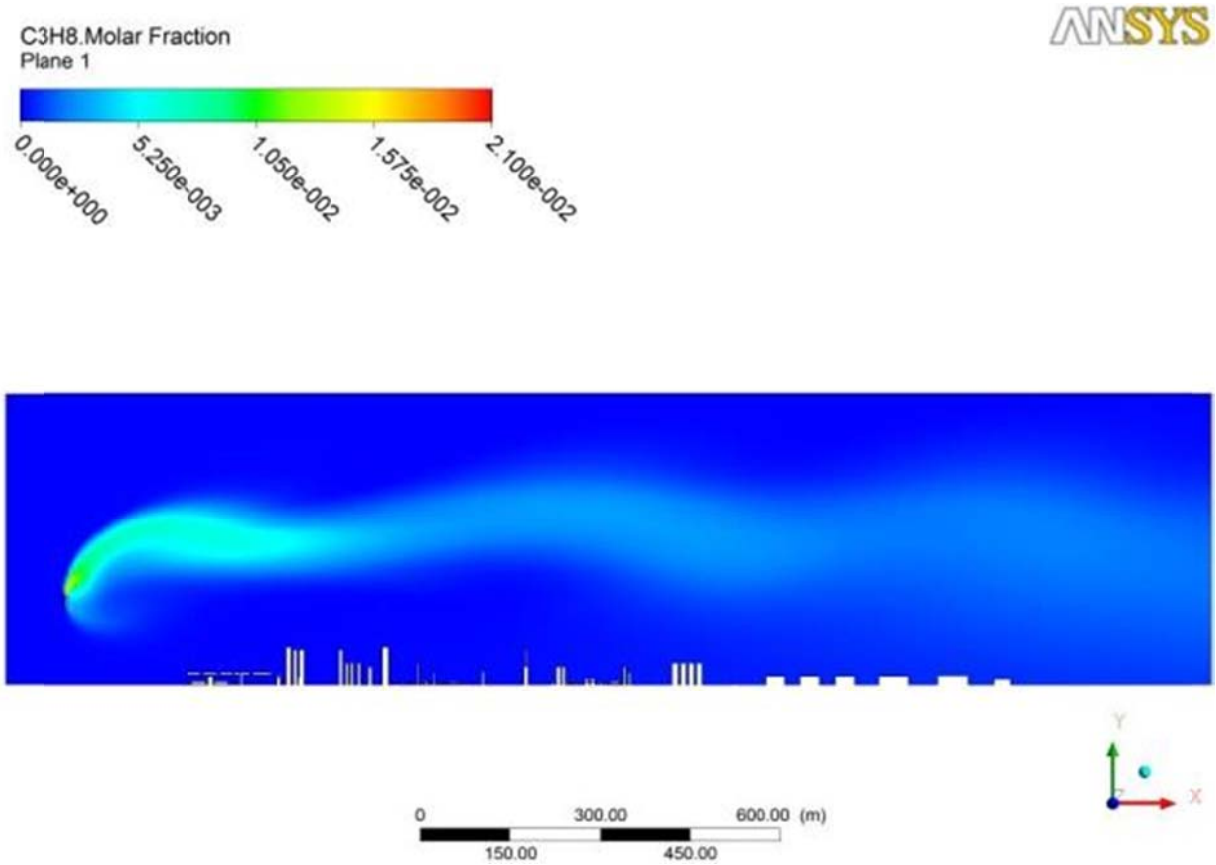


Figura 154: Perfil de concentração do C_3H_8 no Caso 33.

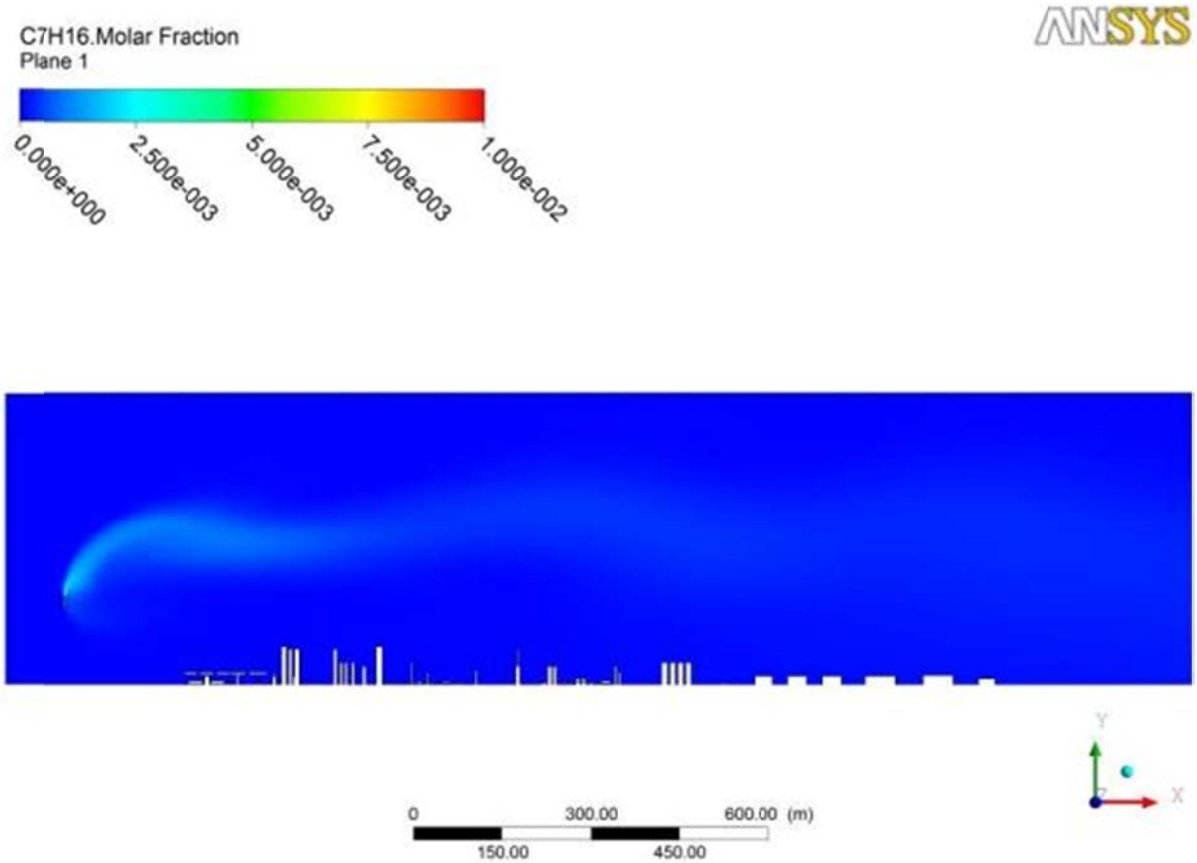


Figura 155: Perfil de concentração do C_7H_{16} no Caso 33.

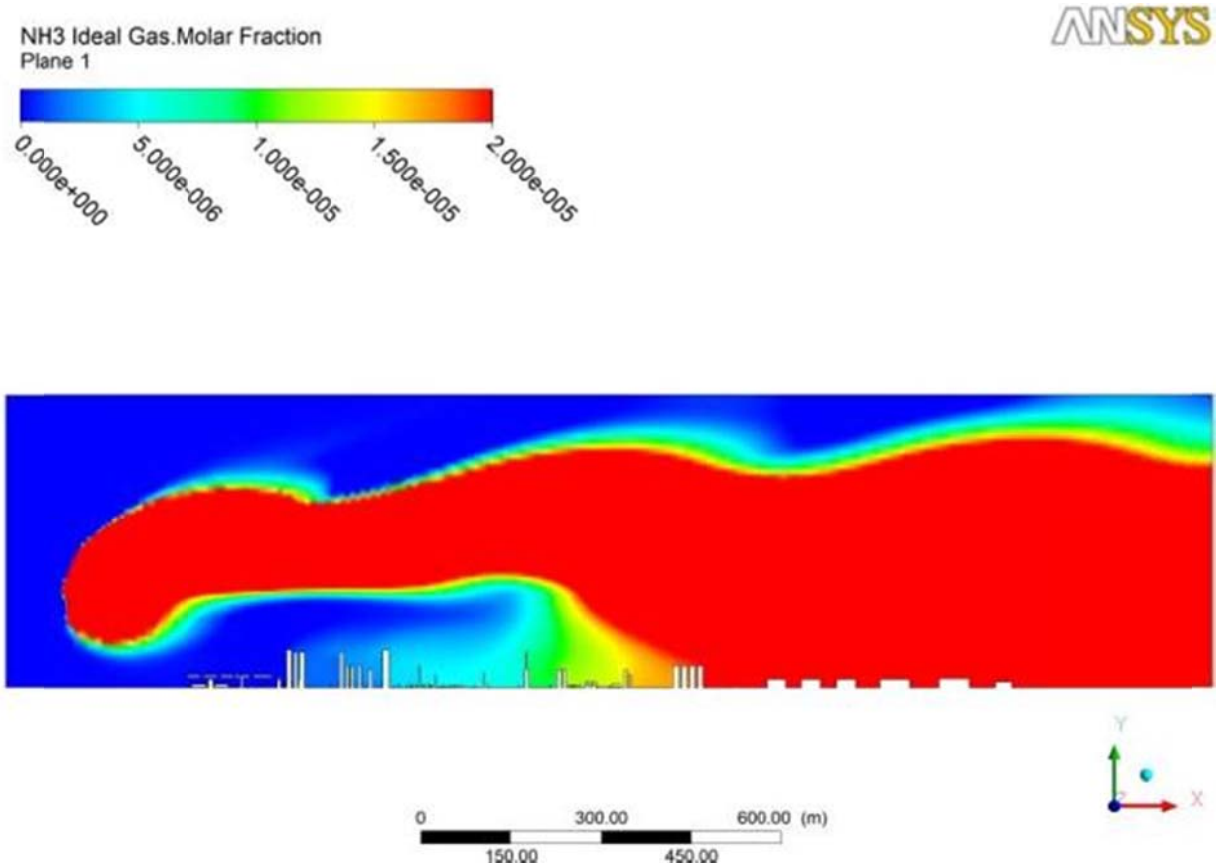


Figura 156: Perfil de concentração do NH_3 no Caso 33.

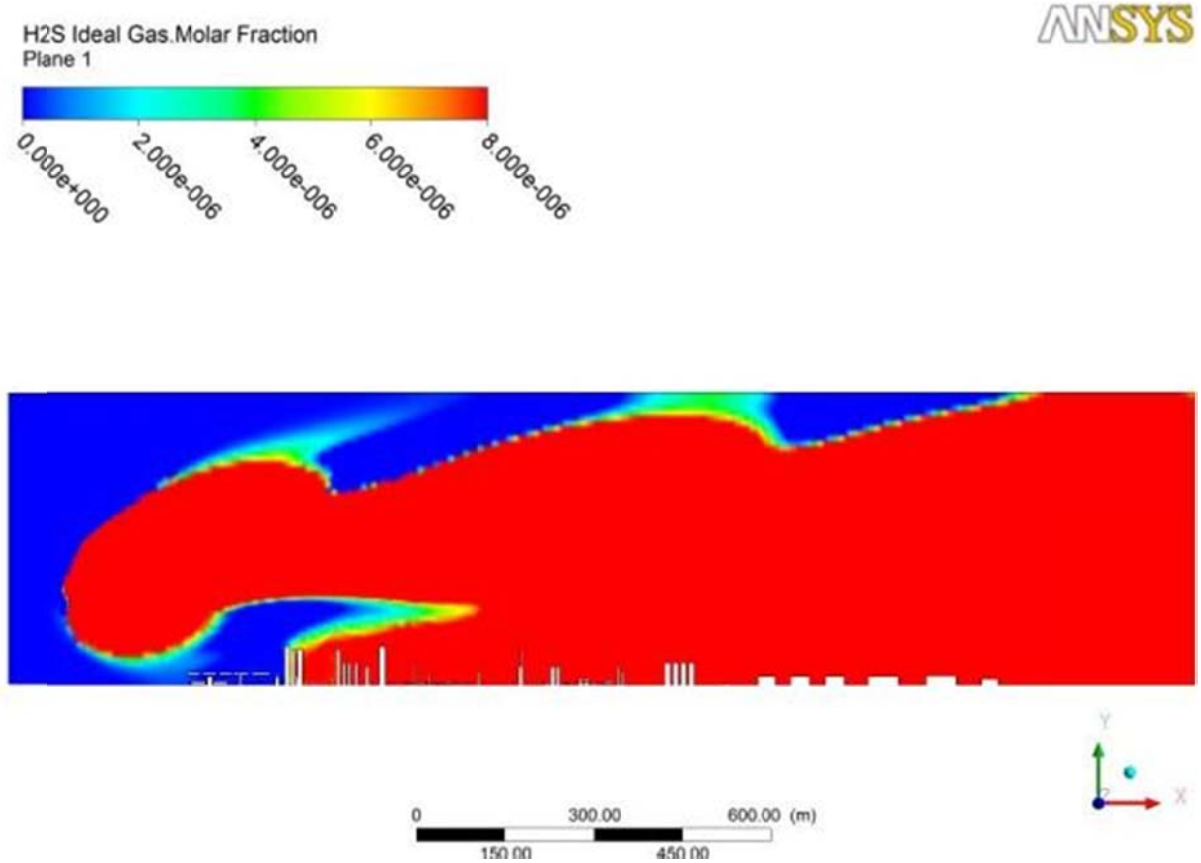


Figura 157: Perfil de concentração do H_2S no Caso 33.

É possível extrapolar os critérios adotados nesse estudo e supor que, assim como a refinaria possui seus equipamentos, a área ao redor da refinaria também pode possuir prédios e demais construções que representam obstáculos ao escoamento do ar ambiente. Isto proporciona a consideração de mesma configuração de geometria e malha para o estudo da dispersão dos gases na região vizinha à refinaria. Esta avaliação é pertinente, já que os ventos podem variar de direção, sendo comum a ocorrência de ventos tanto na direção da refinaria como em direção oposta. Dessa forma, este estudo pode ser considerado como a análise da dispersão unidirecional dos gases, e estes resultados podem ser expandidos como um raio tendo o flare como centro, apenas variando-se a direção do vento.

6 CONCLUSÕES

Os resultados das simulações evidenciaram que são consideráveis os efeitos das condições atmosféricas (classe de estabilidade, intensidade do vento e ocorrência de inversão térmica) sobre a dispersão da pluma ao longo e, em especial, sobre os níveis de concentração dos poluentes estudados (CO_2, NO_2 e SO_2) ao nível do solo.

Foi possível concluir que estas condições devem ser levadas em consideração de modo a assegurar que seja identificado o cenário mais crítico para a avaliação da dispersão de poluentes emitidos por *flares*, no que se refere ao risco à saúde humana, tanto nos limites da refinaria quanto nos seus arredores.

Com relação às atmosferas consideradas instáveis (A e B), verificou-se que tanto em emissões correspondentes à vazão normal de operação quanto no caso de vazão máxima de projeto do *flare*, as plumas se dispersaram em altitudes muito elevadas, não havendo arraste horizontal da pluma pelo vento dentro do domínio estudado e não foram atingidas concentrações mensuráveis de nenhum dos principais poluentes constituintes da pluma ao nível do solo (ver Casos 2 e 16). Conclui-se que as atmosferas instáveis apresentam um nível de risco minimizado, não devendo ser, portanto, utilizadas como cenário de referência para estudos dos potenciais impactos das emissões de gases de *flare* sobre a saúde humana.

Nos casos em que foi considerada atmosfera estável (F) verificou-se que as altas velocidades atingidas pelo vento à medida que se afasta do solo (características deste tipo de atmosfera) impedem o movimento vertical da pluma, mesmo quando consideradas a vazão máxima de projeto do *flare* (vazão de contingência, referente a Ma = 0,5). Desta forma, verificou-se que a ocorrência de inversão térmica tem pequenas probabilidades de afetar as concentrações de poluentes estudados ao nível do solo, quando associadas a atmosferas estáveis, visto que a pluma não atinge elevadas altitudes (ver Casos 11 e 15). Porém, verificou-se que este tipo de atmosfera causou um alongamento da pluma no sentido horizontal devido ao seu característico perfil de vento, fazendo com que a pluma atingisse maiores distâncias horizontais e aumentando a probabilidade de ocorrência de níveis de concentração de poluentes acima dos admissíveis em regiões externas à refinaria, tanto em caso de operação normal quanto em vazão máxima do *flare* (ver Casos 11 e 15). Para atmosfera levemente estável (classe E), observou-se uma maior tendência da pluma em atingir a região da refinaria quando comparada à classe F, porém mantendo elevadas probabilidades de acarretar concentrações acima das admissíveis em regiões vizinhas à refinaria, assim como verificado para a atmosfera estável.

A ocorrência de inversão térmica mostrou-se mais impactante sobre os níveis

de concentração dos poluentes ao nível do solo nos casos onde se considerou atmosfera neutra (classe D) e *flare* operando em condições máximas de vazão (vide Casos 7 e 12). A barreira formada pela camada de inversão térmica ao deslocamento vertical da pluma aumentou fortemente o perfil de concentração ao nível do solo dos seus principais poluentes, fazendo com que ficassem acima dos limites aceitáveis para a saúde humana. Nos casos em que se considerou vazão normal de operação (ver Casos 19 e 24), houve menor impacto da presença da camada de inversão sobre o perfil da pluma, diminuindo, mas não eliminando, a probabilidade de ocorrência de concentrações de poluentes superiores às toleráveis. Desta forma, a atmosfera neutra mostrou-se mais sensível à presença da inversão térmica do que as classes de atmosfera estáveis (E e F), sendo a ocorrência de inversão térmica associada a vazões máximas de projeto do *flare* o cenário mais crítico no que se refere às concentrações de poluentes ao nível do solo .

Para os casos onde foi considerada situação de falha do sistema de queima do *flare*, ou seja, emissão de gases inflamáveis e tóxicos não queimados, verificou-se que, para todas as configurações de classes de estabilidade e vazões (normal e máxima de projeto do *flare*) não foram constatadas concentrações de hidrocarbonetos acima dos seus respectivos limites de inflamabilidade a baixas altitudes. Quanto aos compostos tóxicos (NH_3 e H_2S) estudados nesta situação (falha do *flare*), houve probabilidade da pluma alcançar o nível do solo com concentrações acima dos tolerados nos casos de atmosfera neutra (classe D) e estável (classe F), tanto para a vazão normal quanto para a vazão máxima de projeto do sistema de *flare*.

Desta forma, mesmo em condições de extrema criticidade - tais como: atmosferas neutras e estáveis associadas à ocorrência de inversão térmica, falha do sistema de queima e situações de emergência que solicitem emissões correspondentes à vazão máxima de projeto do *flare* - as simulações demonstraram que, quando respeitados os critérios e recomendações das normas internacionais ANSI / API STD 521 (2008) e ANSI / API STD 537 (2008), o projeto do sistema de *flare* mostra-se extremamente seguro quando à possibilidade de ocorrência de nuvens inflamáveis (hidrocarbonetos não queimados) ao nível do solo.

Por outro lado, verificou-se que para algumas das situações estudadas há possibilidade de formação de nuvens com concentrações de gases tóxicos acima dos toleráveis à saúde humana, em especial, nos casos em que foram consideradas atmosferas neutras (classe D) e estáveis (classe F), com inversão térmica e vazão máxima recomendada de projeto do *flare*.

Recomenda-se que este estudo seja realizado em 3 dimensões e com maior comprimento de domínio. Desta forma será possível representar o vento escoando

ao redor dos obstáculos, gerando resultados mais confiáveis nas regiões entre os equipamentos.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABNT NBR 8969, **Poluição do ar – Terminologia**. Julho de 1985.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE HIGIENISTAS OCUPACIONAIS (ABHO) **TLVs® e BEIs® Baseados na Documentação dos Limites de Exposição Ocupacional (TLVs®) para Substâncias Químicas e Agentes Físicos & Índices Biológicos de Exposição (BEIs®)** da ACGIH®, São Paulo, Dezembro de 2008.

AIChE DOI 10.1002/prs **Process Safety Progress** (Vol.25, No.4), December 2006

ALINOT, C.; MASSON, C. **k–ε Model for the atmospheric boundary layer under various thermal stratification,** J. Sol. Energy. 127, 438–443, 2005.

ALVES, C. A. e ACIOLE, S.D.G. **Formaldeído em escolas: uma revisão.** Quim. Nova, Vol. 35, No. 10, 2025-2039, 2012

ALVES, J. V. B. **Hidrociclone para a Separação do Óleo Residual de Água em Refinarias**. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2012.

ANSI/API STANDARD 521, **Pressure-relieving and Depressuring Systems**, Fifth edition, January 2007 Addendum, May 2008

ANSI/API STANDARD 537, **Flare Details for General Refinery and Petrochemical Service**, Second Edition, December 2008

ANSYS Help 11.0, 2007

API STANDARD 537, **Flare Details for General Refinery and Petrochemical Service**, First Edition, September 2003

ARPEL, ASISTENCIA PETROLERA RECIPROCA LATINOAMERICANA **Guidelines for Atmospheric Emissions Inventory Methodologies in the Petroleum Industry,** ARPEL, Alberta, Canada, 1998.

ARYA, S.P. **Introduction to Micrometerology,** Second Edition. Academic Press, ISBN 01-205-9354-8, XXV+420 pp, 2001.

BARAD, M.L. **Project Prairie Grass. A field program in diffusion.** Geophys. Res. Paper No. 59, Vols. I and II, AFCRF-TR-58-235, Air Force Cambridge research Center, Bedford, MA. (Ed.), 1958.

BARALDI, D., WILKENING, H. AND HEITSCH, M. **CFD simulations of light gas release and mixing in the BMC with CFX**, Nuclear Engineering and Design, February 2007.

BAUKAL, C.E.JR and SCHWARTZ, R.E. **The John Zink Combustion Handbook** - The John Zink Company, LLC. Tulsa, Oklahoma by CRC Press LLC, 2001.

BENARIE, M.M.. **The limits of air pollution modelling.** Atmos. Environ. 21, 1-5, 1987

BENNETT, M.; SUTTON, S. and GARDINER, D. R. C. **An analysis of lidar measurements of buoyant plume rise and dispersion at five power stations.** Atmospheric Environment Vol. 26A, No. 18, pp. 3249 3263, 1992.

BEYCHOK, M.R. **How accurate are dispersion predictions?** In: Hydrocarbon Processing. Gulf Publishing, Houston, TX. , 1979.

BILTOFT, C.A. **Customer Report for Mock Urban Setting Test (MUST).** DPG Doc. No. WDTC-FR-01-121, West Desert Test Center, U.S. Army Dugway Proving Ground, Dugway, UT 84022-5000, 2001.

BIRD, B. R.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. **Fenômenos de Transporte.** 2ª Edição. Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.

BLOCKEN, B.; STATHOPOULOS, T.; CARMELIET, J. **CFD simulation of the atmospheric boundary layer: wall function problems.** Atmos. Environ. 41, 238–252, 2007.

BLUETT, J., GIMSON, N., FISHER, G., HEYDENRYCH, C., FREEMAN, T., GODFREY, J. In: Environment, N.Z.M. (Ed.), **Good Practice Guide for Atmospheric Dispersion modelling.** National Institute of Water and Atmospheric Research, Aurora Pacific Limited and Earth Tech Incorporated, Wellington, ISBN: 0-478-18941-9, 2004.

BOÇON, F.T. **Modelagem Matemática do Escoamento e da Dispersão de Poluentes na Microescala Atmosférica.** Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil, 1998.

BODURTHA, F. T. **Flare stacks-how tall?** Chemical Engineering, 15, 177–180, 1958.

BRET-ROUZAUT, N. E FAVENNEC, J.P. **Petróleo e Gás Natural: Como produzir e a que custo**. Center for Economics and Management (IFP School). Edição brasileira coordenada por Edmilson Moutinho dos Santos e traduzida por Rivaldo Menezes - 2ª Edição rev. e ampl.- Rio de Janeiro - Synergia, 2011.

BRIGGS, G. A. **Discussion: a comparison of the trajectories of rising buoyant plumes with theoretical/empirical models.** Atmospheric Environment 9, 455-457, 1975b.

BRIGGS, G. A. **Plume rise predictions. In Lectures on Air Pollution and Environmental Impact Analyses.** pp. 59-111. American Meteorological Society, Boston, MA, 1975a.

BRZUSTOWISKI, T.A. **Flaring In The Energy Industry.** Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 2, pp. 129-141, 1976.

BURMAN, J. **An evaluation of topographical effects on neutral and heavy-gas with a CFD model.** Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, 315–325, 1998.

CARRASCAL, M.D.; PUIGCERVER, M.; PUIG, P. **Sensitivity of Gaussian plume model to dispersion specifications.** Theor. Appl. Climatol. 48, 147-157, 1993.

CCPS **Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis** (Second ed.) AIChE, New York, 2000

CHANG, J.C., HANNA, S.R. **Air quality model preformance evaluation.** Meteorology and Atmospheric Physics 87, 167–196, doi:10.1007/s00703-003-0070-7, 2004.

CHENG, L. **Concentration and Deposition of Anthropogenic Pollutants in Alberta.** Alberta Research Council, Edmonton, Alta, 1994.

COIRIER, W.J., KIM, S., MARELLA, S. **Progress towards a coupled mesoscale and microscale modeling capability.** Paper 4.1 at American Meteorological Society Seventh Symposium on the Urban Environment, http://www.ametsoc.org., 2005.

COIRIER, W.J.; KIM, S.; MARELLA, S. **Progress towards a coupled mesoscale and microscale modeling capability.** In: Paper 4.1 at American Meteorological Society Seventh Symposium on the Urban Environment, http://www.ametsoc.org., 2007.

CROWL, D.A. and LOUVAR, J.F. **Chemical process safety – Fundamentals with Applications** – Second Edition. Prentice Hall PTR , 2002.

DABBERDT, W.F.; HOYDYSH, W.G.; SCHORLING, M.; YANG, F.; HOLYNSKYJ O. **Dispersion modelling at urban intersections.** Sci Total Environ 169, 93-102, 1995.

DHARMAVARAM, S.; HANNA, S.R.; HANSEN, O.R. **Consequence analysis – using a CFD model for industrial sites.** American Institute of Chemical Engineers Process Safety 24, 316–327, 2005.

EPA - UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (http://www2.epa.gov/aboutepa/epa-history), acessada em Julho 2013.

EPA (US ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY) **Emission and air quality modelling tools for near-roadway applications.** Report EPA/600/R-09/001; 2008. December.

EPA-ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. **Complete DEGADIS**, 1990. Executable and source FORTRAN Code (933KB,ZIP). Available from http://www.epa.gov/ttn/scram/.

ERO, M.I.O. **Buoyant plume rise in atmospheric inversions.** Int. J. Heat Mass Transfer 20, 403-407, 1977.

FEDOROVICH, E. e THÄTER, J. **A wind tunnel study of gaseous tracer dispersion in the convective boundary layer capped by a temperature inversion.** Atmospheric Environment 36, 2245–2255, 2002.

FEDOROVICH, E. E THÄTER, J. **A wind tunnel study of gaseous tracer**

dispersion in the convective boundary layer capped by a temperature inversion. Atmospheric Environment 36 (2002) 2245–2255

FLECK, A. B. **Dispersão de Gases Inflamáveis em Plataforma Offshore: Localização de Detectores.** Dissertação de Mestrado – Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2008.

FOUDHIL, H.; BRUNET, Y.; CALTAGIRONE, J.-P**. A fine scale k–ε model for atmospheric flow over heterogeneous landscapes**. Environ. Fluid Mech. 5, 247–265, 2004.

FURTADO, M.T. **Modelo adiabático da atmosfera terrestre compatível com o aquecimento global e o efeito estufa.** Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 34, n. 3, 3310, 2012.

GJESDAL, T. **Local grid refinement for improved description of leaks in industrial gas safety analysis.** Compute Visual Sci. 3, 25–32, 2000.

Gomes, E.G. **Dispersão de Gases Inflamáveis em Unidades de Processamento de Petróleo: Otimização de Detectores.** Dissertação de Mestrado, Escola de Química/UFRJ, 2012.

GOYAL, R.K. and AL-ANSARI, E.G. **Impact of emergency shutdown devices on relief system sizing and design.** Journal of Loss Prevention in the Process Industries 22 (2009) 35–44

GREENPEACE http://www.greenpeace.org.br/clima/pdf/protocolo_kyoto.pdf, acessada em julho de 2013

HAJEK, J. D. and LUDWIG, E.E. **How to Design Safe Flare Stacks, Part 1**, Petro/Chem Engineer, 1960, Volume 32, Number 6, pp. C31–C38; Part 2, Petro/Chem Engineer, 1960, Volume 32, Number 7, pp. C44–C51

HALL, R.C. **Evaluation of Model Uncertainty (EMU)—CFD modelling of near-field atmospheric dispersion.** Project EMU Final Report to the European Commission (Data CD also available with report)7. WS Atkins Doc No. WSA/AM5017/R7, WS Atkins, Woodcote Grove, Ashley Road, Epsom, Surrey KT18 5BW, UK. (Ed.), 1997.

HANNA, S., BAJA, E. **A simple urban dispersion model tested with tracer data from Oklahoma City and Manhattan**. Atmos. Environ. 43, 778-786, 2009.

HANNA, S.; WHITE, J.; TROLIER, J.; VERNOT, R.; BROWN, M.; GOWARDHAN, A.; KAPLAN, H.; ALEXANDER, Y.; MOUSSAFIR, J.; WANG, Y.; WILLIAMSON, C.; HANNAN, J.; HENDRICK, E. **Comparisons of JU2003 observations with four diagnostic urban wind flow and Lagrangian particle dispersion models.** Atmospheric Environment 45, 4073 – 4081, 2011.

HANNA, S.R., CHANG, J.C. **Use of the Kit Fox field data to analyze dense gas modeling issues.** Atmos. Environ. 35, 2231–2242, 2001.

HANNA, S.R., TEHRANIAN, S., CARISSIMO, B., MACDONALD, R.W.,LOHNER, R. **Comparisons of model simulations with observations of mean flow and turbulence within simple obstacle arrays.** Atmos. Environ. 36, 5067–5079, 2002.

HANNA, S.R.; BROWN, M.J.; CAMELLI, F.E.; CHAN, S.; COIRIER, W.J.; HANSEN, O.R.; HUBER, A.H.; KIM, S.; REYNOLDS, R.M. **Detailed simulations of atmospheric flow and dispersion in urban downtown areas by Computational Fluid Dynamics (CFD) models - an application of five CFD models to Manhattan.** Bull. Am. Meteorol. Soc. 87, 1713-1726, 2006.

HANNA, S.R.; CHANG, J.C.; STRIMAITIS, D.G. **Hazardous gas model evaluation with field observations.** Atmospheric Environment 27, 2265–2285, ISSN: 1352-2310, 1993.

HANNA, S.R.; DHARMAVARAM, S.; ZHANG, J.; SYKES, I.; WITLOX, H.; KHAJEHNAJAFI, S.; KOSLAN, K. **Comparison of six widely-used dense gas dispersion models for three recent chlorine railcar accidents.** Process Saf. Prog., 27, pp. 248–259, 2008.

HANNA, S.R.; HANSEN, O.R.; DHARMAVARAM, S. **FLACS CFD air quality model performance evaluation with Kit Fox, MUST, Prairie Grass, and EMU observations.** Atmospheric Environment 38, 4675–4687, 2004.

HANNA, S.R.; HANSEN, O.R.; ICHARD, M.; STRIMAITIS, D. **CFD model simulation of dispersion from chlorine railcar releases in industrial and urban areas**. Atmospheric Environment 43, 262–270, 2009.

HANSEN, O.R.; RENOULT, J.; BAKKE, J.R. **Explosion risk assessment: how the results vary with the approach chosen.** Fall Symposium Proceedings, Mary Kay O' Connor Process Safety Centre, Department of Chemical Engineering, Texas A&M University, 3122 TAMU, College Station, TX, pp. 395-410, 2001.

HANSEN, O.R.; TALBERG, O.; BAKKE, J.R. **CFD-based methodology for quantitative gas explosion risk assessment in congested process areas: examples and validation status**, in: Proceedings of the AIChE/CCPS International Conference and Workshop on Modeling the Consequences of Accidental Releases of Hazardous Materials, September 28–October 1, San Francisco, CA, pp. 457-477, ISBN 0-8169-0781-1, 1999.

HARGREAVES, D.M.; WRIGHT, N.G. **On the use of the k–ε model in commercial CFD software to model the neutral atmospheric boundary layer.** J. Wind Eng. Ind. Aerod. 95,355–369, 2007.

HAVENS, J.A., SPICER T.O. **A dispersion model for elevated dense gas jet chemical releases.** Report EPA-450/4-88-006a. US Environmental Protection Agency. 1988.

HAVENS, J.A., SPICER, T.O., GUINNUP, D.W. **Extension of the Degadis Atmospheric Dispersion Model for Elevated Jet Releases.** 6th International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industry, Oslo, pp. 72.1-72.23. , 1989.

http://ambiente.hsw.uol.com.br/inversao-termica.htm

http://en.citizendium.org/wiki/Flare_stack, acessada em junho de 2013

http://www.ecodesenvolvimento.org/posts/2012/dezembro/cop-18-firma-extensao-do-protocolo-de-kyoto-mas#ixzz2YOHBiNl4 , acessada em julho de 2013.

http://www.flareindustries.com/products/elevated-flares.php, acessada em junho de 2013

INTERNATIONAL PANEL ON CLIMATE CHANGE (IPCC) **Revised Guidelines for National Greenhouse Inventories**, Geneva, IPCC, 1996.

ISNARD, A.A. **Investigação Computacional do Escoamento e da Dispersão de Poluentes Atmosféricos sobre Topografias Complexas** Tese de Doutorado - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio. Rio de Janeiro. Abril de 2004

JOHNSON, M. R.and KOSTIUK, L. W. **A parametric model for the efficiency of a flare in crosswind.** Proceedings of the Combustion Institute, Volume 29, 2002/pp. 1943–1950

JOHNSON, M.R. and CODERRE, A.R. **Opportunities for CO_2 equivalent emissions reductions via flare and vent mitigation: A case study for Alberta.** Canada International Journal of Greenhouse Gas Control 8, 121–131, 2012.

KIRCHGESSNER, D.A.; LOTT, R.A.; COWGIIL, R.M.; HARRISON, M.R.; SHIRES, T.M. **Estimate of methane emissions from the u.s. natural gas industry** Chemosphere, Vol. 35, No. 6. pp. 1365-1390,1997

KOOPMAN, R.P.; ERMAK, D.L. and CHAN, S.T. **A review of recent field tests and mathematical modelling of atmospheric dispersion of large spills of denser-than-air gases**. Atmospheric Environment Vol.23, No. 4, pp. 731-745, 1989

KOZANOGLU, B.; ZÁRATE, L.; GÓMEZ-MARES, M.; CASAL, J. **Convective heat transfer around vertical jet fires: An experimental study.** Journal of Hazardous Materials 197, 104– 108, 2011.

KWAK, K.; BAIK, J. **A CFD modeling study of the impacts of NOx and VOC emissions on reactive pollutant dispersion in and above a street canyon.** Atmospheric Environment 46, 71-80, 2012.

LAMB, R.G. **Diffusion in the convective boundary layer.** In: Nieuwstadt, F.T.M., van Dop, H. (Eds.), Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling. D. Reidel, Dordrecht, pp. 159–229, 1982.

LAMB, R.G. **Diffusion in the convective boundary layer.** In: Nieuwstadt, F.T.M., van Dop, H. (Eds.), Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling. D. Reidel, Dordrecht, pp. 159–229, 1982.

LANDUCCI, G.; TUGNOLI, A.; BUSINI, V.; DERUDI, M.; ROTA, R.; COZZANI, V. **The**

Viareggio LPG accident: lessons learnt. J. Loss Prevention Proc. Ind., 24, pp. 466–476, 2011.

LEABEY D. M. e DAVIES M. J. E. **Observations of plume rise from sour gas flares.** Atmospheric Environment 18, 917-922, 1984.

LISBOA, H.M. **Controle da Poluição Atmosférica – Cap VIII: Meteorologia e Dispersão Atmosférica.** Montreal, Dezembro de 2007

LUDWIG **Ludwig's Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants** (Fourth Edition), 2007, Pages 575-770 - PROCESS SAFETY AND PRESSURE-RELIEVING DEVICES

MALISKA, C.R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**, LTC Editora, Florianópolis, Brasil, 1995.

MANINS, P.C. **Partial penetration of an elevated inversion layer by chimney plumes.** Atmospheric Environment 13, 733-741, 1979.

MAZZOLDI, A.; HILL, T.; COLLS, J.J. **Assessing the risk for CO2 transportation within CCS projects, CFD modeling.** International Journal of Greenhouse Gas Control 5, 816–825, 2011.

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.

MCBRIDE, M.A.; REEVES, A.B.; VANDERHEYDEN, M.D.; LEA, C.J.; ZHOU, X.X. **Use of advanced techniques to model the dispersion of chlorine in complex terrain.** Transactions of the Institution of Chemical Engineers, 79, 2001.

MENEZES, P.S.F. **Validação do modelo matemático ISCST3 de dispersão atmosférica a partir das emissões de dióxido de enxofre de uma refinaria.** Dissertação de Mestrado Profissional em Gerenciamento e Tecnologia Ambiental no Processo Produtivo - Escola Politécnica - Universidade Federal da Bahia - Salvador, 2006.

MILLIEZ, M.; CARISSIMO, B. **Numerical simulations of pollutant dispersion in an**

idealized urban area, for different meteorological conditions. Boundary-Layer Meteorology 122, 321–342, 2006.

MINISTÉRIO DO MEIO AMBIENTE
(http://www.mma.gov.br/clima/ciencia-da-mudanca-do-clima/efeito-estufa-e-aquecimento-global), acessada em julho 2013

MOORE, D. J. **A comparison of the trajectories of rising buoyant plumes with theoretical/empirical models.** Atmospheric Environment g, 441-457, 1974.

MOORE, D. J. **Discussion: a comparison of the trajectories of rising buoyant plumes with theoretical/empirical models.** Atmospheric Environment 9, 457-459, 1975.

MURALEEDHARAN, P.M.; MOHANKUMAR, K.; SIVAKUMAR, K.U. **A study on the characteristics of temperature inversions in active and break phases of Indian summer monsoon.** Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics 93, 11–20, 2013.

MURENA, F.; FAVALE, G.; VARDOULAKIS, S.; SOLAZZO, E. **Modelling dispersion of traffic pollution in a deep street canyon: application of CFD and operational models.** Atmos Environ 43, 2303–11, 2009.

NFPA 497, **Recommended Practice for the Classification of Flammable Liquids, Gases, or Vapors and of Hazardous (Classified) Locations for Electrical Installations in Chemical Process Areas.** NFPA - National Fire Protection Association, 1 Batterymarch Park, Quincy, MA 02169-7471 An International Codes and Standards Organization, 2012 Edition

NORSOK Z-013 **Risk and Emergency Preparedness Analysis, Norsok standard.** Available from Standard Norge, Postboks 242, N-1326 Lysaker, Norway , 2001.

NORMA REGULAMENTADORA 9 – NR-9 **Programa de Prevenção de Riscos Ambientais.** Brasil.Aprovada pela Portaria n. 3214 de 8-6-1978 e com redação determinada pela Portaria n. 25 de 29-12-1994.

NORMA REGULAMENTADORA 15 – NR-15 **Atividades e Operações insalubres.** Brasil. Aprovada pela Portaria n. 3214 de 8-6-1978.

OOMS, G. **A New method for the calculation of the plume path of gases emitted by a stack.** Atmospheric Environment, 6, 899–909,1972.

OOMS, G.; MAHIEU, A. P.; ZELIS, F. **The plume path of vent gases heavier than air.** In First International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries (pp. 211–219). Amsterdam: Elsevier, 1974.

PALAZZI E. **A simple analytical method for determining the atmospheric dispersion of upward-directed high velocity releases.** Atmospheric Environment 36, 1183–1193, 2002.

PALAZZI, E.; PALAZZI, F.; FABIANO, B. **A unified short-cut model approach to size safe venting stacks and other blow-off devices for hazardous vapours.** Chemical Engineering Science 58, 1955 – 1967, 2003.

PEMEX. **Informe 2000. Seguridad, Salud y Medio Ambiente, PEMEX**. México, DF, 2001.

PFLUCK, C.E.F. **Simulação fluidodinâmica da dispersão de poluentes na atmosfera.** Dissertação de Mestrado, Escola de Engenharia/UFRGS, 2010

PONTIGGIA, M.; DERUDI, M.; ALBA, M.; SCAIONI,M.; ROTA, R. **Hazardous gas releases in urban areas: Assessment of consequences through CFD modeling** Journal of Hazardous Materials 176, 589–596, 2010.

PONTIGGIA, M.; DERUDI, M.; BUSINI, V.; ROTA, R. **Hazardous gas dispersion: A CFD model accounting for atmospheric stability classes** Journal of Hazardous Materials 171, 739–747, 2009.

PONTIGGIA, M.; LANDUCCI, G.; BUSINI, V.; DERUDI, M.; ALBA, M.; SCAIONI, M.; BONVICINI, S.; COZZANI, V.; ROTA, R. **CFD model simulation of LPG dispersion in urban areas** Atmospheric Environment Volume 45, Issue 24, Pages 3913–3923, August 2011.

PULLEN, J.; BORIS, J.P.; YOUNG, T.; PATNAIK, G.; ISELIN, J. **A comparison of contaminant plume statistics from a Gaussian puff and urban CFD model for two large cities.** Atmospheric Environment 39, 1049– 1068, 2004.

QUINTANILHA, L. **O universo das emissões atmosféricas e a atuação do setor industrial.** Revista Meio Ambiente Industrial, Julho/Agosto 2009

Refining Processes Handbook, 2003, Pages 270-307.

RESOLUÇÃO CONAMA nº 01, de 23 de janeiro de 1986. Publicada no D.O.U, de 17 de fevereiro de 1986, Seção 1, páginas 2548-2549

Resolução CONAMA nº 03 de 28 de junho de 1990. Publicada no D.O.U, de 22/08/90, Seção I, Págs. 15.937 a 15.939.

Resolução CONAMA nº 05 de junho de 1989. Publicada no D.O.U, de 30/08/89, Seção I, Pág. 15.048

RESOLUÇÃO CONAMA nº 08, de 6 de dezembro de 1990. Publicada no DOU, de 28 de dezembro de 1990, Seção 1, página 25539

REYNOLDS, R.M. **ALOHA 5.0, Theoretical description.** National Oceanic and Atmospheric Administration, Seattle, Washington. NOS ORCA-65, 1992.

RICHARDS J. M. **The penetration of interfaces by cylindrical thermals.** Q. J. R. met. Soc. 89, 254-264, 1963.

RIDDLE, A.; CARRUTHERS, D.; SHARPE, A.; MCHUGH, C.; STOCKER, J. **Comparisons between FLUENT and ADMS for atmospheric dispersion modeling.** Atmos. Environ. 38, 1029–1038, 2004.

SCARGIALI, A.; DI RIENZO, E.; CIOFALO, M.; GRISAFI, F.; BRUCATO, A. **Heavy gas dispersion modeling over a topographically complex mesoscale – A CFD based approach.** Transactions of the Institution of Chemical Engineers, 242–256 , 2005.

SCIRE, J.S.; ROBE, F.R.; FERNAU, M.E.; INSLEY, E.M.; YAMARTINO, R.J. **A User's Guide for the CALMET Meteorological Model (Version 5.0).** Earth Tech. Inc., Concord, MA. 1997

SCIRE, J.S.; STRIMAITIS, D.G.; YAMARTINO, R.J. **A User's Guide for the CALPUFF Dispersion Model (Version 5.0)**. Earth Tech. Inc., Concord, MA. , 2000.

SCOTT, H. M.; SOSKOLNE, C.L.; MARTIN, S.W.; ELLEHOJ, E.A.; COPPOCK, R.W.; GUIDOTTI, T.L.; LISSEMORE, K.D. **Comparison of two atmospheric-dispersion models to assess farm-site exposure to sour-gas processing-plant emissions** Preventive Veterinary Medicine 57, 15-34, 2003.

SEINFELD, H.J., PANDIS, S.N. **Atmospheric Chemistry and Physics.** Wiley, New York (Chapter 18), 1998.

SERFATY, R. **Combustão e Queimadores**. Material de pesquisa do CENPES, 2010

SHARMA, N.; CHAUDHRY, K.K.; RAO, C.V. **Vehicular pollution prediction modelling: a review of highway dispersion models.** Transp Rev 24,409–35, 2004.

SHORE D. **Making the flare safe**. J. Loss Prey. Process Ind. Vol. 9. No. 6. pp. 363-381, 1996

SKLAVOUNOS, S., RIGAS, F. **Simulation of Coyote series trials – Part I: CFD estimation of non-isothermal LNG releases and comparisons with box-model predictions.** Chem. Eng. Sci. 61, 1434–1443, 2005.

SKLAVOUNOS, S.; RIGAS, F. **Simulation of coyote series trials — Part I: CFD estimation of non-isothermal LNG releases and comparison with box-model predictions**. Chem. Eng. Sci. 61, 1434–1443, 2006.

SKLAVOUNOS, S.; RIGAS, F. **Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles.** J. Haz. Mater. A. 108, 9–20, 2004.

SMITH, J.C. **Atmospheric Dispersion Modelling.** Annual Report 1996/ 1997. Chilton. Didcot, Oxfordshire, National Radiological Protection Board, 1999.

SOARES, F.C.M.M. **Dispersão atmosférica de gás natural por ruptura em duto submarino pressurizado.** Dissertação de Mestrado, Escola de Química/UFRJ, 2006

SORBJAN, Z. **Structure of the Atmospheric Boundary Layer**, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 317pp. , 1989.

SORBJAN, Z., 1989. **Structure of the Atmospheric Boundary Layer.** Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 317pp.

STEVEN, R.H.; BROWN, M.J.; CAMELLI, F.E.; CHAN, S.T.; COIRIER, W.J.; HANSEN, O.R.; HUBER, A.H.; KIM, S.; REYNOLDS, R.M. **Detailed simulations of atmospheric flow and dispersion in downtown Manhattan, an application of five Computational Fluid Dynamics models.** B Am. Meteorol. Soc, 2006, doi:10.1175/BAMS-87-12-1713.

STRAITZ, III, J. F. **Flare Case Histories Demonstrating Problems and Solutions.** Wiley InterScience (www.interscience.wiley.com). DOI 10.1002/prs.10156, November 2006

TAIAO, M. M. T. **Good Practice Guide for Atmospheric Dispersion Modelling.** National Institute of Water and Atmospheric Research, Aurora Pacific Limited and Earth Tech Incorporated for the Ministry for the Environment, www.mfe.govt.nz, 2004.

TANG, W.; HUBER, A.; BELL, B. and SCHWARZ, W. **Application of CFD simulations for short-range atmospheric dispersion over open fields and within arrays of buildings.** In: Proceedings of the 14th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA. Atlanta, GA, EPA, 2006.

TIWARY, A.; ROBINS, A.; NAMDEO, A.; BELL, M. **Air flow and concentration fields at urban road intersections for improved understanding of personal exposure.** Environment International 37, 1005–1018, 2011.

UIJT DE HAAG, P.A.M. e ALE, B.J.M. **Guidelines for Quantitative Risk Assessment (Purple Book).** Committee for the Prevention of Disasters, The Hague, 1999.

USEPA, AP-42 **Compilation of air pollutant emission factors.** Research Triangle Park, NC, USA. Available on the webpage: www.epa.gov/ttn/chieff , 2001.

USEPA-OAQPS **User's Guide for the Industrial Source Complex (ISC3) Dispersion Models, vols. I and II.** Office of Air Quality Planning and Standards, US Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC., 1995.

VARDOULAKIS, S.; FISHER, B.E.A.; PERICLEOUS, K.; GONZALEZ-FLESCA, N. **Modelling air quality in street canyons: a review.** Atmos Environ 37,155–82, 2003.

VARDOULAKIS, S.; VALIANTIS, M.; MILNER, J.; APSIMON, H. **Operational air**

pollution modelling in the UK—street canyon applications and challenges. Atmos Environ 44, 4622–37, 2007.

VAZ, C. E. M.; MAIA, J. L. P. e SANTOS, W. G. - **Tecnologia da indústria do gás natural**, 2008 – Ed. Blucher

VENDRIG, M.; SPOUGE, J.; BIRD, A.; DAYCOCK, J.; JOHNSEN, O. **Risk Analysis of the Geological Sequestration of Carbon Dioxide.** In: Crown (Ed.) Department of Trade and Industry's Cleaner Coal Technology Transfer Programme, R246 DTI/Pub URN 03/1320, 2003.

VERSTEEG, H.K., MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics – The Finite Volume Method**, Longman, London, 1995.

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 15, 507–515, 2002.

VILLASENOR, R.; MAGDALENO, M.; QUINTANAR, A.; GALLARDO, J.C.; LÓPEZ, M.T.; JURADO, R.; MIRANDA, A.; AGUILAR, M.; MELGAREJO, L.A.; PALMERÍN, E.; VALLEJO, C.J.; BARCHET, W.R. **An air quality emission inventory of offshore operations for the exploration and production of petroleum by the Mexican oil industry** Atmospheric Environment 37, 3713–3729, 2003.

WALLACE, J.; NAIR, P.; KANAROGLOU, P. **Atmospheric remote sensing to detect effects of temperature inversions on sputum cell counts in airway diseases.** Environmental Research 110, 624–632, 2010.

WALLACE, J.A.; KANAROGLOU, P. **The effect of temperature inversions on ground-level nitrogen dioxide (NO2) and fine particulate matter (PM2.5) using temperature profiles from the Atmospheric Infrared Sounder (AIRS).** Sci. Tot. Environ. 407, 5085–5095, 2009b.

WALLACE, J.A.; KANAROGLOU, P. **The sensitivity of OMI-derived nitrogen dioxide to boundary layer temperature inversions.** Atmos. Environ. 43, 3596–3604, 2009a.

WESSELINGH, J. A. E KRISHNA, R. **Mass Transfer.** Ellis Horwood series in

Chemical Engineering, Great Britain, 1990.

WILLIS, G.E. E DEARDORFF, J.W. **Buoyant plume dispersion and inversion entrapment in and above a laboratory mixed layer.** Atmospheric Environment 21, 1725-1735, 1987.

WOODHILL **Barriers to overcome in the implementation of CO2 capture and storage: rules and standards for the transmission and storage.** In: IEA (Ed.), A report prepared by Woodhill Engineering Consultant for International Energy Agency, Cheltenham: Report number: PH4/23, 2003.

YADAV, R., PAREKH, A., GUPTA, A. and DAS, A.K. **Multiphase CFD Simulation of Flow Inside Liquid Seal Drums of the Refinery Flare System.** Industrial & Engineering Chemistry Research 51, 1073–1082, 2012.

YAMADA, T. **Merging CFD and atmospheric modelling capabilities to simulate airflows and dispersion in urban areas.** Computational Fluid Dynamics 13, 329–341, 2004.

ZHANG, X. e GHONIEM, A.F. **A computational model for the rise and dispersion of wind-blown, buoyancy-driven plumes-I. Neutrally stratified atmosphere** Atmospheric Environment Vol. 27A, No 15, pp.2295-2311, 1993

ZHANG, X. e GHONIEM, A.F. **A computational model for the rise and dispersion of wind-blown, buoyancy-driven plumes-iii. Penetration of atmospheric inversion.** Atmospheric Environment Vol. 28, No 18, pp.3019 – 3032, 1994