



Simulação da liberação e dispersão de gases densos: um estudo de caso

Lorena Fernanda dos Santos de Souza

Projeto de Final de Curso

Orientadores

Heloísa Lajas Sanches, *D. Sc.*

Ana Mehl, *D. Sc.*

Rio de Janeiro, RJ

Março de 2011

Simulação da liberação e dispersão de gases densos: um estudo de caso

Lorena Fernanda dos Santos de Souza

Projeto de Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Aprovado por:

Fernando Luiz Pellegrini Pessoa, D. Sc.

Bruno Bôscaro França, MSc.

Joana Lopes Borges, MSc.

Orientado por:

Heloísa Lajas Sanches, D. Sc.

Ana Mehl, D. Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil
Março de 2011

Souza, Lorena Fernanda dos Santos de.

Simulação da liberação e dispersão de gases densos: um estudo de caso /Lorena Fernanda dos Santos de Souza. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ. 2011.

81 páginas

(Projeto Final) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2010.

Orientadoras: Heloísa Lajas Sanches e Ana Mehl.

1. acidentes. 2. matlab®. 3. industrias de processos químicos. 4. Projeto Final de Curso (Graduação – UFRJ/EQ). 5. Heloísa Lajas Sanches e Ana Mehl. I. Simulação da liberação e dispersão de gases densos: um estudo de caso

Dedico este trabalho a minha mãe e minha avó – meus exemplos -
e a todos aqueles que estavam presentes nos momentos difíceis.

"Jamais considere seus estudos como uma obrigação, mas como uma oportunidade invejável (...) para aprender a conhecer a influência libertadora da beleza do reino do espírito, para seu próprio prazer pessoal e para proveito da comunidade à qual seu futuro trabalho pertencer"

Albert Einstein

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais e irmão, minha família, que me deram condições de alcançar esse título, apoio incondicional e muita paciência nos momentos difíceis da faculdade.

Sem vocês não conseguiria.

Aos nossos amigos da EQ, minha nova família que me ajudou principalmente a aliviar os estresses e que me aceitou do jeito que eu sou. Aos professores que deram o conhecimento e a oportunidade de aprender, e me ensinaram a paixão por essa linda profissão.

E não poderia deixar de agradecer as minhas orientadoras pela dedicação e paciência.

Resumo do Projeto de Final de Curso apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro de Químico.

Simulação da liberação e dispersão de gases densos: um estudo de caso

Lorena Fernanda dos Santos de Souza

Março, 2011

Orientadores: Heloísa Lajas Sanches, *D. Sc.*

Ana Mehl, *D. Sc.*

Por estar cada vez mais complexa, a indústria de processos químicos apresenta um potencial cada vez maior para acidentes. Que geralmente são iniciados com a liberação seguida ou não de dispersão do material contido em vasos e tubos. E estes materiais podem ser tóxico, inflamáveis e/ou explosivos.

Para poder prevenir a ocorrência destes acidentes ou minimizar as consequências dos acidentes que por ventura ocorram são utilizados modelos matemáticos, que devem descrever desde os vazamentos, modelos fonte, até a dispersão do produto gasoso na atmosfera, estes são os modelos de dispersão.

Os modelos matemáticos podem ser rigorosos ou não- rigorosos. Modelos mais simples são de mais fácil resolução, porém, muitas vezes não conseguem representar o fenômeno adequadamente. Dessa forma, este trabalho tem o objetivo de avaliar e comparar modelos de dispersão com o auxílio de um estudo de caso, um acidente onde houve a liberação contínua de uma gás denso, o Cl_2 , por cerca de 3 horas. Os modelos foram simulados no *software* Matlab® 7.6.0 (2008).

Os resultados apresentados foram satisfatórios em relação à proposta inicial. Foram feitas análises valores diferentes de velocidades do vento, utilizando-se parâmetros do acidente escolhido. Ficou comprovada a diferença existente entre os modelos de dispersão apresentados, e que nem sempre se faz necessário a utilização de modelos mais complexos.

Sumário

| | |
|---|----|
| Capítulo 1 - Introdução | 1 |
| Capítulo 2 - Modelos Fonte para Gases | 4 |
| 2.1. Vazamento de um gás através de orifícios | 4 |
| 2.2. Vazamento de um gás através de tubos | 7 |
| 2.3. Vazamento Tipo Flash | 11 |
| Capítulo 3 - Modelo de Dispersão para gases | 13 |
| 3.1. Modelo de Pasquill & Gifford | 16 |
| 3.2. Modelo do “ <i>Bureau of Mines</i> ” | 21 |
| 3.3. Modelo de Britter & McQuaid | 21 |
| 3.4. Modelo de van Ulden | 25 |
| Capítulo 4 – O Estudo de Caso: dispersão de cloro gasoso | 30 |
| 4.1. Descrição do Acidente..... | 30 |
| 4.2. Características e Toxicologia do Cloro | 34 |
| 4.3 - Características de Corrosão do Aço-Carbono pelo Cloro | 37 |
| Capítulo 5 - Programa Computacional..... | 39 |
| Capítulo 6 - Resultados e Discussão | 43 |
| 6.1 – Simulação da liberação do cloro gasoso | 44 |
| 6.2 – Simulação da dispersão do tipo pluma | 47 |
| 6.3 – Simulação da dispersão do tipo | 55 |
| Capítulo 7 - Conclusões e Sugestões..... | 63 |
| Capítulo 8 - Referência Bibliográfica..... | 65 |
| Apêndice A | 66 |
| Apêndice B | 72 |

Índice de Figura

| | |
|--|-----------|
| <i>Figura 1 - (a) Nuvem formada por um vazamento aproximadamente instantâneo e (b) Pluma formada por um vazamento contínuo.</i> | <i>13</i> |
| <i>Figura 2 - Correlação de Britter e McQuaid – Dispersão tipo pluma para gás denso, CROWL e LOUVAR, 2002.</i> | <i>23</i> |
| <i>Figura 3 - Correlação de Britter e McQuaid – Dispersão tipo pluma para gás denso, CROWL e LOUVAR, 2002.</i> | <i>24</i> |
| <i>Figura 4 – Em (a) Modelo de van Ulden para emissão instantânea e em (b) Modelo de van Ulden para emissão contínua.....</i> | <i>26</i> |
| <i>Figura 5 – Tanque de armazenamento de cloro</i> | <i>31</i> |
| <i>Figura 6 - Mapa da região próxima a DPC Festus</i> | <i>32</i> |
| <i>Figura 7 - Visualização da programação do Modelo de Pasquill & Gifford para dispersão contínua de gases com dados do relatório investigativo.</i> | <i>39</i> |
| <i>Figura 8 - Isopleta de concentração de Cl₂ nas direções y e x, sendo z(altura em relação ao nível do solo) igual a 0 para liberação contínua</i> | <i>40</i> |
| <i>Figura 9 - Gráfico Concentração de Cl₂ ao nível do solo versus distância na direção do vento, x – Modelo de Pasquill & Gifford</i> | <i>41</i> |
| <i>Figura 10 - Gráfico Concentração de Cl₂ ao nível do solo vs distância na direção do vento, x – Modelo de Britter-McQuaid, dispersão pluma.....</i> | <i>42</i> |
| <i>Figura 11 - Variação de largura e altura nos primeiros instantes da dispersão do Cl₂ vs distância na direção do vento segundo Modelo de van Ulden - Pluma.....</i> | <i>42</i> |
| <i>Figura 12 - Visualização da programação do Modelo Fonte liberação tipo flah com dados do relatório investigativo.</i> | <i>45</i> |
| <i>Figura 13 - (a) Isopleta resultante do modelo de Pasquill & Gifford (b) Isopleta resultante do modelo de Bureau of Mines - – velocidade do vento igual a 2,2 m/s ...</i> | <i>47</i> |
| <i>Figura 14 - Gráfico comparativo Concentração de Cl₂ ao nível do solo vs distância na direção do vento, x – Modelo de Pasquill & Gifford e Bureau of Mines – Pluma – velocidade do vento igual a 2,2 m/s</i> | <i>48</i> |
| <i>Figura 15 -Gráfico comparativo Concentração de Cl₂ ao nível do solo vs distância na direção do vento, x – Modelo de Pasquill & Gifford, Bureau of Mines e Britter & McQuaid – Pluma –velocidade do vento igual a 2,2 m/s</i> | <i>49</i> |

| | |
|---|----|
| <i>Figura 16 - Variação de largura e altura nos primeiros instantes da dispersão do Cl₂ vs distância na direção do vento segundo Modelo de van Ulden - Pluma</i> | 50 |
| <i>Figura 17 -(a) Isopleta resultante do modelo de Pasquill & Gifford (b) Isopleta resultante do modelo de Bureau of Mines – velocidade do vento igual a 1,3 m/s</i> | 50 |
| <i>Figura 18 - Gráfico comparativo Concentração de Cl₂ ao nível do solo vs distância na direção do vento, x – Modelo de Pasquill & Gifford e Bureau of Mines – Pluma – velocidade do vento igual a 1,3 m/s</i> | 51 |
| <i>Figura 19 -Gráfico comparativo Concentração de Cl₂ ao nível do solo vs distância na direção do vento, x – Modelo de Pasquill & Gifford, Bureau of Mines e Britter & McQuaid – Pluma –velocidade do vento igual a 1,3 m/s</i> | 51 |
| <i>Figura 20 - Variação de largura e altura nos primeiros instantes da dispersão do Cl₂ vs distância na direção do vento segundo Modelo de van Ulden – Pluma – velocidade do vento igual a 1,3 m/s</i> | 52 |
| <i>Figura 21 - Comparação dos resultados entre diferentes velocidades (a) Modelo de Pasquill&Gifford e (b) Modelo de Bureau of Mines</i> | 53 |
| <i>Figura 22 - Variação de largura e altura nos primeiros instantes da dispersão do Cl₂ vs distância na direção do vento segundo Modelo de van Ulden – Pluma – velocidade do vento igual a 0,05 m/s</i> | 54 |
| <i>Figura 23 -(a) Isopleta resultante do modelo de Pasquill & Gifford (b) Isopleta resultante do modelo de Bureau of Mines – velocidade do vento igual a 2,2 m/s.</i> | 55 |
| <i>Figura 24 - -(a) Isopleta resultante do modelo de Pasquill & Gifford (b) Isopleta resultante do modelo de Bureau of Mines – velocidade do vento igual a 2,2 m/s no tempo de 10 min</i> | 56 |
| <i>Figura 25 -Gráficos a diferentes tempos de Concentração de Cl₂ ao nível do solo vs distância na direção do vento, x - Modelo de Pasquill & Gifford e Bureau of Mines - Nuvem - velocidade do vento igual a 2,2 m/s.</i> | 56 |
| <i>Figura 26 - Gráfico comparativo Concentração de Cl₂ ao nível do solo vs distância na direção do vento, x – Modelo de Pasquill & Gifford, Bureau of Mines e Britter & McQuaid – Pluma –velocidade do vento igual a 2,2 m/s</i> | 57 |
| <i>Figura27 -(a) Isopleta resultante do modelo de Pasquill & Gifford (b) Isopleta resultante do modelo de Bureau of Mines – velocidade do vento igual a 1,3 m/s.</i> | 58 |

Figura 28 -Gráfico comparativo Concentração de Cl₂ ao nível do solo vs distância na direção do vento, x – Modelo de Pasquill & Gifford, Bureau of Mines - Nuvem - velocidade do vento igual a 1,3 m/s58

Índice de Tabelas

| | |
|---|-----------|
| <i>Tabela 1 -Classes de estabilidade atmosférica para uso com o modelo de dispersão Pasquill-Gifford. CROWL e LOUVAR, 2002 (A = extremamente instável; B = moderadamente instável; C = ligeiramente instável; D = neutramente estável; E = ligeiramente estável; F = moderadamente estável)</i> | <i>18</i> |
| <i>Tabela 2 – Equações para os coeficientes de dispersão de Pasquill & Gifford – Pluma (m) CROWL e LOUVAR, 2002.....</i> | <i>19</i> |
| <i>Tabela 3 - Equações para os coeficientes de dispersão de Pasquill & Gifford – Pluma (m) CROWL e LOUVAR, 2002.....</i> | <i>19</i> |
| <i>Tabela 4 –Equações usadas para aproximação das curvas de correlação-Pluma CROWL e LOUVAR, 2002.</i> | <i>24</i> |
| <i>Tabela 5 - Equações usadas para aproximação das curvas de correlação-Nuvem CROWL e LOUVAR, 2002.</i> | <i>25</i> |
| <i>Tabela 6 - Parâmetros do acidente segundo o relatório investigativo.....</i> | <i>34</i> |
| <i>Tabela 7 – Efeitos causados ao homem em diferentes concentrações de Cl₂</i> | <i>36</i> |
| <i>Tabela 8 - Valores do ERPG do cloro em ppm. (CROWL e LOUVAR, 2002)</i> | <i>37</i> |
| <i>Tabela 9 – Dados utilizados para os cálculos de calor.....</i> | <i>46</i> |
| <i>Tabela 10 – Resultados de distâncias (m) na velocidade do vento a uma determinada concentração de Cl₂– velocidade 2,2 m/s</i> | <i>59</i> |
| <i>Tabela 11 - Resultados de distâncias (m) na velocidade do vento a uma determinada concentração de Cl₂ – velocidade 1,3 m/s</i> | <i>60</i> |
| <i>Tabela 12- Resultados de distâncias (m) na velocidade do vento a uma determinada concentração de Cl₂ – velocidade 0,05 m/s</i> | <i>60</i> |
| <i>Tabela 13 - Valores de distância (m) para diferentes modelos para a concentração de 60 ppm</i> | <i>61</i> |

Capítulo 1 - Introdução

A área de segurança de processos, também denominada prevenção de perdas, abrange a prevenção de acidentes por meio do uso de técnicas apropriadas de identificação de perigo, avaliação de riscos e prevenção de acidentes ou da eliminação do potencial de perigo antes que o acidente ocorra (CROWL e LOUVAR, 2002).

Atualmente, as indústrias estão crescendo de forma acelerada e grande parte desse crescimento é devido aos avanços tecnológicos. Processos cada vez mais complexos, como operações a altas pressões e/ou altas temperaturas e com produtos químicos altamente reativos e/ou tóxicos, são resultados desse desenvolvimento tecnológico. Por sua vez, processos cada vez mais complexos, apresentam um potencial cada vez maior para acidentes.

Estes provêm de uma liberação que pode ser seguida de incêndio ou explosão envolvendo uma ou mais substâncias químicas perigosas, conduzindo a sérios perigos para o homem e o meio ambiente, imediatos ou a longo prazo, internamente e externamente à unidade de processo (DROGARIS, 1993).

Acidentes geralmente são iniciados pela liberação não planejada de material tóxico, inflamável ou explosivo no ambiente.

A toxicidade é a capacidade de um agente químico ou físico causar danos em organismos vivos. Existem vários meios pelos quais as substâncias tóxicas podem entrar nos organismos; são eles: ingestão, inalação, injeção e absorção dérmica. Entre estas, as mais comuns em acidentes em indústrias químicas são a inalação de vapores e a absorção dérmica.

A etapa de avaliação de riscos envolve a utilização de modelos matemáticos para representar o evento desde o seu início, ou seja, do vazamento até a dispersão da substância no ambiente. Os modelos fonte fornecem as seguintes informações: tipo

de vazamento, quantidade vazada e duração do vazamento. Já os modelos de dispersão fornecem informações sobre a área atingida, bem como o perfil de concentração do produto liberado.

Existem vários modelos fonte para descrever a liberação de gases, sendo que alguns têm base teórica e outros têm base empírica. Para isso, é necessário o conhecimento da substância analisada e as características do acidente. Sempre que existirem incertezas quanto à extensão processo de liberação ou dispersão do material, deve-se admitir a pior condição garantindo assim a segurança do projeto.

Existem modelos que descrevem a dispersão de gases densos ou de empuxo neutro (gases com densidade próxima à do ar). No caso de gases com baixa densidade, modelos como o de Pasquill & Gifford servem para estimar a concentração da substância gasosa de um vazamento na direção do vento no qual o gás se dissipa no ar atmosférico. Modelos como o de Britter & McQuaid, servem para modelar a dispersão de gases densos.

Todo modelo matemático a ser desenvolvido pode ser considerado não-rigoroso ou rigoroso. Exemplos de modelos de dispersão não-rigorosos são: Pasquill-Gifford e Bureau of Mines, e são considerados não-rigorosos porque utilizam simplificações para obter a equação de resolução do modelo. Modelos não-rigorosos são de mais fácil resolução, porém, muitas vezes não conseguem representar o fenômeno adequadamente. Por outro lado, modelos rigorosos, são muitas vezes muito difíceis de resolver, não tornando seu uso viável, além de às vezes envolver parâmetros, que nem sempre são conhecidos. Por exemplo, o modelo de dispersão de van Ulden. É fundamental então saber quando é realmente necessário o uso de modelos mais rigorosos.

O objetivo do presente trabalho é simular um modelo fonte tipo flash, além de analisar e comparar os resultados obtidos para diferentes modelos de dispersão, Pasquill-Gifford, Bureau of Mines, Britter McQuaid e van Ulden. Para tal, foi utilizado o *software* Matlab® 7.6.0 (2008), onde foram implementados alguns modelos

matemáticos disponíveis na literatura, tanto de emissão quanto de dispersão de gases, citados nos capítulos seguintes. Pretende-se analisar a real necessidade da utilização dos modelos mais complexos tendo-se a possibilidade da utilização dos mais simples, uma vez que modelos mais complexos demandam o conhecimento de um número maior de parâmetros e equações mais complexas.

Um estudo de caso sobre um acidente envolvendo liberação de uma grande quantidade de Cl_2 (Investigation Report - Chlorine Release, 2003) foi escolhido para auxiliar essa comparação.

Este trabalho encontra-se dividido em seis capítulos, ao longo dos quais são apresentados conceitos envolvidos na emissão e dispersão de gases em caso de um acidente. No Capítulo 2 são definidos conceitos sobre os modelos fonte em caso de vazamento de substâncias gasosas. Ainda nesse capítulo, são apresentados os modelos matemáticos que descrevem os diferentes tipos de emissão de gases em caso de um vazamento.

Os modelos de dispersão utilizados são apresentados no Capítulo 3. Apesar de ambos os modelos serem descritos para gases e líquidos, neste trabalho serão tratados apenas acidentes envolvendo a liberação de gases.

No Capítulo 4 são apresentados os programas escritos em Matlab® para a simulação dos modelos mencionados acima.

No Capítulo 5 encontra-se a descrição do estudo de caso escolhido, bem como os resultados obtidos a partir das informações dos capítulos anteriores.

Por fim, no Capítulo 6, encontram-se as conclusões deste trabalho e as sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2 - Modelos Fonte para Gases

Um *modelo fonte* é aquele que descreve, principalmente, a quantidade, a vazão e o estado físico do material liberado, com base em equações empíricas e teóricas (CROWL e LOUVAR (2002)). Para isso, é necessário o conhecimento das substâncias envolvidas na liberação e as características do possível acidente. Se existem incertezas quanto ao processo de liberação do material, deve-se admitir as piores condições possíveis (as que causem mais danos) na análise de um determinado acidente, garantido assim a segurança do projeto.

Existem diversos tipos de vazamento dentro de uma indústria. Existem dois modelos fonte que descrevem o vazamento de gases. São eles: o vazamento de um gás através de um orifício e o vazamento de um gás através de um tubo (podendo este último ser adiabático ou isotérmico). (CROWL e LOUVAR (2002)).

2.1. Vazamento de um gás através de orifícios

Aplicando um balanço de energia a um tanque contendo gás em que há um orifício, obtém-se as equações que fornecem a vazão de gás no vazamento. Pode-se considerar também o escoamento de um gás compressível, em que a energia potencial pode ser desprezada e não há trabalho de eixo, mas em que a contribuição do termo de energia cinética não é desprezível. A equação de balanço de energia simplificada é:

$$\int \frac{dP}{\rho} + \Delta \left(\frac{\bar{u}^2}{2\alpha g_c} \right) + F = 0 \quad (2.1)$$

Onde:

P é a pressão (força/área)

ρ é a densidade do fluido (massa/volume)

\bar{u} é a velocidade média instantânea de escoamento do fluido (comprimento/tempo)

α é o fator de correção do perfil de velocidade, adimensional

g_c é a constante gravitacional (comprimento/tempo²)

g é a aceleração da gravidade (comprimento/tempo²)

F é um termo de perda de carga (comprimento*força/massa);

Definindo-se um coeficiente de descarga, C_1 e admitindo-se uma expansão isentrópica de um gás ideal, para a qual

$$P v^\gamma = \frac{P}{\rho^\gamma} = \text{constante} \quad (2.2)$$

Onde:

γ é razão entre as capacidades caloríficas a P e V constantes, $\gamma = C_p/C_v$

v é o volume.

Rearranjando as equações, obtém-se a equação que fornece o valor da vazão de liberação, Qm :

$$Qm = C_0 A P_0 \sqrt{\frac{2 g_c M}{R_g T_0} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \left[\left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{2}{\gamma}} - \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{(\gamma+1)}{\gamma}} \right]} \quad (2.3)$$

Para vazamento de gases compressíveis, é necessária, em geral, a determinação da vazão máxima de liberação. Por isso, é preciso determinar a pressão de vazão sônica (*choked*), P_{choked} , que é a máxima pressão de saída, resultando na máxima vazão de gás através do orifício ou tubo. Esta determinação é importante, uma vez que vazamentos em condições de estrangulamento são comuns. A expressão para P_{choked} é obtida através da derivação da equação 2.3 em relação a P/P_o , igualando-a a zero:

$$P_{choked} = \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (2.4)$$

Para pressões de saída menores que P_{choked} , a velocidade do fluido no estrangulamento do orifício será igual a velocidade sônica, e a velocidade e a vazão mássica não aumentarão mesmo que se diminua a pressão de saída. A máxima vazão é obtida a partir de:

$$(Qm)_{choked} = C_0 A P_0 \sqrt{\frac{\gamma g_c M}{R_g T_0} \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}}} \quad (2.5)$$

Onde:

M é o massa molar do gás em questão

T_0 é a temperatura da fonte

R_g é a constante dos gases ideal (Energia/(mol*temperatura)), e

C_0 é igual a 0.61 se o orifício tiver cantos vivos e o número de Reynolds for maior que 30.000, não estando na condição estrangulamento. Caso contrário, usa-se $C_0 = 1$.

Para uma análise mais conservadora (a que levará a um vazamento mais grave), deve-se utilizar $C_0 = 1$.

2.2. Vazamento de um gás através de tubos

Apesar de nas situações reais o vazamento de gás através de um tubo que rompeu ser um fenômeno complexo, especialmente quando o seu escoamento é compressível, divide-se a análise destes vazamentos em dois casos mais simples: o vazamento de gás através de uma tubulação isolada (vazamento adiabático) e o vazamento de gás através de uma tubulação não isolada e à temperatura constante (vazamento isotérmico).

É importante a definição do Número de Mach para a modelagem de ambos os casos. Um Mach ($Ma = 1,0$) é equivalente à velocidade de 1234,8 km/h no ar nas condições ambientes.

$$Ma = \frac{u}{a'} \quad (2.6)$$

2.2.1. Vazamento Adiabático

Um gradiente de pressão na direção do deslocamento do fluido é uma força motriz para o seu escoamento em dutos. Um gás irá expandir ao longo do duto devido à diminuição da pressão. A expansão leva ao aumento da velocidade do gás e, conseqüentemente, da sua energia cinética. Como há conversão de energia térmica em cinética neste processo, a temperatura do gás diminui. Contudo, forças de atrito estão presentes entre o gás e a parede do duto, e estas tendem a provocar o aumento da temperatura do gás. Ou seja, dependendo das magnitudes da energia cinética e da energia de atrito, tanto o aumento quanto a diminuição da

temperatura podem ocorrer. Neste caso, o balanço de energia é válido, e útil para descrever as mudanças de temperatura no escoamento de um gás.

As hipóteses para a modelagem deste escoamento são:

- $\frac{g}{g_c} \Delta z \approx 0$, variação de energia potencial aproximadamente nula
- $W_s = 0$, trabalho no eixo igual a zero
- O fator de atrito de Fanning é constante ao longo da tubulação em questão
- Número de Reynolds elevados
- Gás ideal
- Tubo adiabático

Primeiramente, é necessário o cálculo da pressão de estrangulamento, pois se o sistema estiver em condição de estrangulamento usam-se equações diferentes. Com base nas hipóteses apresentadas, o modelo fonte para vazamento de um gás num tubo adiabático é uma combinação da sequência de equações 2.7, 2.8, 2.9.

1) Calcula-se o fator de atrito de Fanning, f . Para escoamento turbulento desenvolvidos, ou seja, número de Reynolds elevados, f é independente do número de Reynolds. Logo:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = 4 \log \left(3.7 \frac{d}{\varepsilon} \right) \quad (2.7)$$

Onde:

d é o diâmetro do tubo, e

ε é a rugosidade do tubo.

2) Com a combinação das duas equações 2.8 e 2.9 é possível obter Ma_1 .

$$Y_1 = 1 + \frac{\gamma - 1}{2} Ma_1^2 \quad (2.8)$$

$$\frac{\gamma + 1}{2} \ln \left[\frac{2Y_1}{(\gamma + 1)Ma_1^2} \right] - \left(\frac{1}{Ma_1^2} - 1 \right) + \gamma \cdot K_{total} = 0 \quad (2.9)$$

Sendo $K_{total} = \left(\frac{4fL}{d} \right) + K_{fittings}$, onde $K_{fittings}$ é obtido a partir de tabelas com coeficientes de perda correspondentes a conexões ao longo do tubo, como válvulas, joelhos e tês.

3) Com Ma_1 obtém-se P_{choked} . Se este for maior ou igual à pressão de saída, P_2 , o sistema pode ser considerado em condição de estrangulamento e as equações 2.10 e 2.11 são aplicáveis.

$$G_{choked} = Ma_1 P_1 \sqrt{\frac{\gamma g_c M}{R_g T_1}} \quad (2.10)$$

$$Q_m = G_{choked} A \quad (2.11)$$

Onde G é o fluxo mássico (massa / (área*tempo))

Se não, usam-se equações estendidas para primeiramente obter T_2 e, posteriormente, obter G e Q_m .

2.2.2. Vazamento Isotérmico

No caso de escoamento isotérmico de um gás em um tubo, admite-se a velocidade do gás bem abaixo da velocidade do som. O gradiente de pressão ao longo do tubo é a força motriz do escoamento. Como o gás se expande devido ao gradiente de pressão, a velocidade deve aumentar para uma vazão mássica constante. Também a partir da equação do balanço de energia, e utilizando as seguintes hipóteses:

- $\frac{g}{g_c} \Delta z \approx 0$, variação de energia potencial aproximadamente nula
- $W_s = 0$, trabalho no eixo igual a zero
- O fator de atrito de Fanning, termo de perda de atrito, é constante ao longo da tubulação em questão
- Número de Reynolds elevados
- Gás ideal
- Temperatura constante ao longo da tubulação

É possível obter a vazão de gás do vazamento, equação 2.14.

$$P_{choked} = Ma_1 P_1 \sqrt{\gamma} \quad (2.12)$$

$$G_{choked} = Ma_1 P_1 \sqrt{\frac{\gamma g_c M}{R_g T_1}} \quad (2.13)$$

$$Q_m = G_{choked} A \quad (2.14)$$

2.3. Vazamento Tipo Flash

Neste caso, quando um líquido é estocado a uma pressão acima da sua temperatura de ebulição, pode haver problemas de grande proporção em caso de acidente. Se o tanque, mangueiras ou conexões envolvidas no armazenamento desse líquido se romperem, o líquido pode evaporar parcialmente e ocasionar uma explosão (CROWL & LOUVAR, 2002). Além disso, a vaporização de um líquido pressurizado pode resfriar o ambiente de tal forma que deixe os materiais metálicos próximos mais frágeis e suscetíveis à ruptura pela redução de temperatura. A vaporização do líquido pode também congelar água dentro de uma tubulação próxima e fazê-la romper o tubo (KLETZ, 1995). Sendo m a massa original do líquido, C_p a capacidade calorífica do líquido (energia/massa*temperatura), T_0 a temperatura do líquido antes da despressurização, T_b a temperatura de ebulição do líquido, então a energia em excesso contida no líquido superaquecido é dado por:

$$Q = m C_p (T_0 - T_b) \quad (2.15)$$

E é essa energia que vaporiza o líquido. Se ΔH_v é o calor de vaporização do líquido, a massa de líquido vaporizada, m_v , é dada por:

$$m_v = \frac{Q}{\Delta H_v} = \frac{mC_p(T_0 - T_b)}{\Delta H_v} \quad (2.16)$$

Essa equação assumi propriedades físicas constante no intervalo T_0 e T_b . Uma expressão mais geral, sem essa suposição, pode ser derivada como a seguir. A variação de massa m resultado da mudança de temperatura T é dada por:

$$dm = \frac{mC_p}{\Delta H_v} dT \quad (2.17)$$

Essa equação integrada desde a temperatura inicial T_0 (com massa m) e com a temperatura de ebulição final T_b (com massa $m - m_v$). Resultando no modelo matemático 2.18.

$$\ln\left(\frac{m - m_v}{m}\right) = \frac{-C_p(T_0 - T_b)}{\Delta H_v} \quad (2.18)$$

Capítulo 3 - Modelo de Dispersão para gases

A emissão de gases e líquidos é seguida da dispersão destes. No caso da liberação de um gás, há a formação de uma *nuvem* (*puff*) ou uma *pluma*. O gás disperso forma uma nuvem quando a liberação da substância ocorre de forma praticamente instantânea. O gás forma uma pluma quando ocorre de forma contínua, como, por exemplo, em uma chaminé. As Figuras 1(a) e 1(b) mostram estes tipos de dispersão.

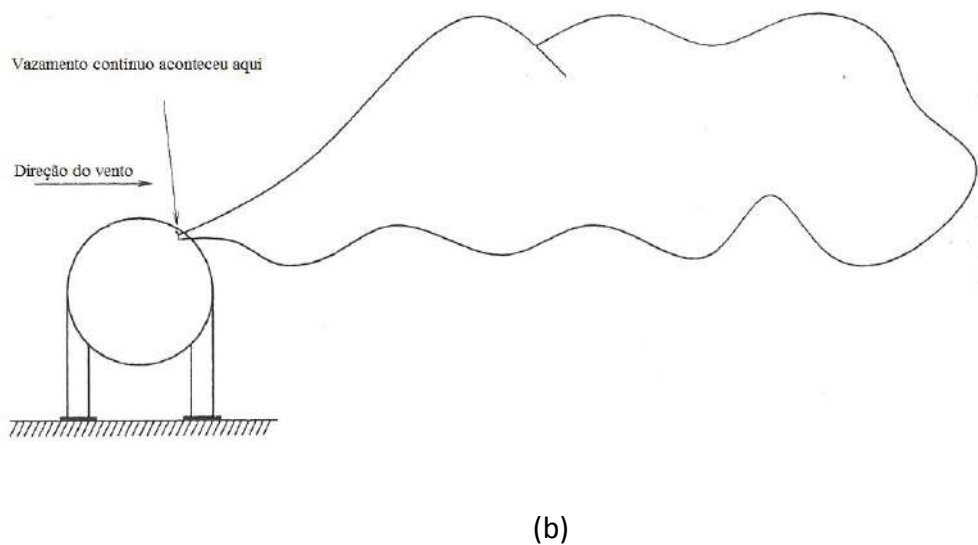
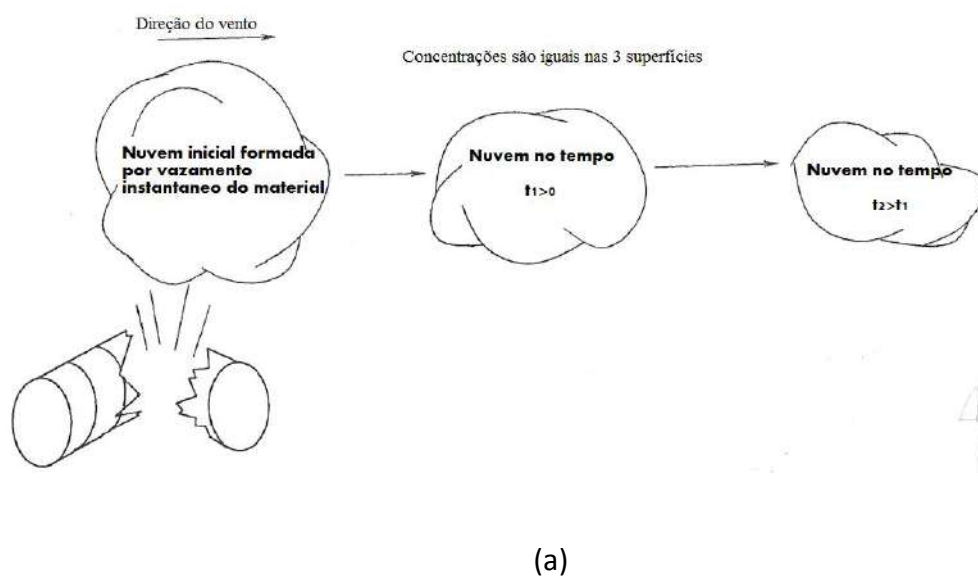


Figura 1 - (a) Nuvem formada por um vazamento aproximadamente instantâneo e (b) Pluma formada por um vazamento contínuo. CROWL e LOUVAR, 2002

As dispersões de gases podem ser classificadas quanto à elevação da fonte (ao nível do solo ou elevada) e quanto à estabilidade da atmosfera (estável, instável ou neutra).

Alguns outros fatores que influenciam na dispersão do material tóxico são a velocidade e a direção do vento, o local de ocorrência do acidente (ambiente rural, com poucas construções ao redor, ou ambiente urbano), as características do material liberado, e o horário de ocorrência do acidente (dia ou noite).

Durante um acidente, como a ruptura de uma tubulação ou de um tanque contendo material tóxico estocado, pode haver liberação de grandes quantidades deste material, em velocidade e concentração tais que podem se expandir dentro da planta ou ir em direção a comunidades próximas. Com o objetivo de prevenir estes acidentes ou reduzir o impacto destes, é importante identificar problemas antes do acidente ocorrer e entender os aspectos da liberação e dispersão do material. Para isso se faz necessária a utilização de modelos de dispersão.

Existem vários modelos de dispersão descritos na literatura. Os que foram programados no Matlab® para estudo neste projeto são os modelos de Pasquill & Gifford, do *Bureau of Mines* (modificação do modelo de Pasquill & Gifford para gás denso), de Britter & McQuaid e de van Ulden (sendo estes últimos ambos para dispersão de gás denso).

Para melhor entendimento das equações das equações que serão utilizadas, é necessário compreender a origem dessas equações.

O modelo de nuvem pode ser usado para descrever uma pluma; uma pluma é simplesmente uma liberação contínua de nuvens. Porém, se a informação de uma pluma no estado estacionário é suficiente, o modelo de pluma é recomendado porque é mais fácil de ser usado. Para estudos envolvendo plumas dinâmicas (por exemplo o efeito de mudanças na direção do vento em uma pluma), o modelo de nuvem deve ser usado.

Considerando uma liberação instantânea de um material de massa fixa Qm^* em uma expansão infinita no ar e com sistemas de coordenadas fixa na fonte. Assumindo que não haja reação ou difusão molecular, a concentração C do material resultado da liberação é dado pela equação de advecção:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j C) = 0 \quad (3.1)$$

Onde u_j é a velocidade do ar, e o subscrito j representa a soma sobre todas as direções das coordenadas x , y e z . Se a velocidade u_j for igual a média da velocidade do vento e a equação resolvida, nós acharíamos que o material dispersa muito mais rápido do que previsto. Isso é devido a turbulência no campo de velocidade. Se pudéssemos especificar exatamente a velocidade do vento com a posição e o tempo, incluindo os efeitos resultados da turbulência, a equação 3.1 prediria a concentração correta. Infelizmente, não existe nenhum modelo adequado para descrever turbulência. Como resultado uma aproximação é usada.

$$u_j = \langle u_j \rangle + u'_j \quad (3.2)$$

Onde:

$\langle u_j \rangle$ é a média da velocidade e

u'_j é a flutuação estocástica resultado da turbulência

Segue-se que a concentração varia como resultado da velocidade de campo:

$$C = \langle C \rangle + C' \quad (3.3)$$

Onde:

$\langle C \rangle$ é a concentração média

C' é a flutuação estocástica

Uma equação adicional é necessária para descrever o fluxo turbulento. A abordagem usual é definir um coeficiente de difusão turbulenta K_j (área/tempo):

$$\langle u'_j C' \rangle = -K_j \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial x_j} \quad (3.4)$$

Substituindo todas as equações na 3.1 chega-se na seguinte equação:

$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_j \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial x_j} \right) \quad (3.5)$$

Essa equação juntamente com limites apropriados e condições iniciais formam a base fundamental para os modelos de dispersão.

3.1. Modelo de Pasquill & Gifford

Para a geração desse modelo, Pasquill e Gifford modificaram modelos já existentes para a dispersão de plumas e nuvens, como os de Sutton (que inovou ao deixar de

considerar somente a difusão fickeana) e o do próprio Pasquill (LEES, 1995). Estes modelos anteriores faziam uso do coeficiente de difusão turbulenta (K_j) o qual, em geral, pode variar com a posição, com o tempo, com a velocidade do vento e com as condições climáticas. Embora o uso desse coeficiente seja útil na teoria, a determinação experimental de seus valores é difícil. No modelo de Pasquill-Gifford, usa-se a relação primeiramente proposta por Sutton para o *coeficiente de dispersão* (o desvio-padrão da concentração na direção x , que é a direção do vento) (CROWL & LOUVAR, 2002):

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{2} \langle C \rangle^2 (ut)^{2-n} \quad (3.6)$$

Onde:

$\langle C \rangle$ é a concentração média no tempo do material (massa/comprimento³),

u é a velocidade do vento (comprimento/tempo),

t é o tempo, e

n é um parâmetro a ser ajustado.

Os coeficientes de dispersão nas direções y (perpendicular ao vento) e z (vertical), denotados por σ_y e σ_z , são escritos através de equações semelhantes. A obtenção experimental de valores dos coeficientes de dispersão é muito mais fácil do que a dos coeficientes de difusão turbulenta (CROWL e LOUVAR, 2002).

Os coeficientes de dispersão dependem das condições atmosféricas e da distância na direção do vento (x). As condições atmosféricas são classificadas de acordo com seis diferentes classes de estabilidade, demonstradas na tabela 1.

Tabela 1 -Classes de estabilidade atmosférica para uso com o modelo de dispersão Pasquill-Gifford. CROWL e LOUVAR, 2002 (A = extremamente instável; B = moderadamente instável; C = ligeiramente instável; D = neutramente estável; E = ligeiramente estável; F = moderadamente estável)

| Velocidade do vento na superfície (m/s) | Insolação do Dia | | | Condições da Noite | |
|---|------------------|----------|-------|-----------------------|-------------------|
| | Forte | Moderada | Fraca | Nublado ou com nuvens | Com poucas nuvens |
| <2 | A | A-B | B | F | F |
| 2-3 | A-B | B | C | E | F |
| 3-4 | B | B-C | C | D | E |
| 4-6 | C | C-D | D | D | D |
| >6 | C | D | D | D | D |

As classes de estabilidade dependem da velocidade do vento e quantidade de luz solar. Durante o dia, um aumento da velocidade do vento resulta em uma estabilidade atmosférica maior, enquanto durante a noite acontece o contrário. Isso ocorre devido a mudanças no perfil vertical de temperatura do dia para a noite.

Os valores dos coeficientes de dispersão podem, então, ser obtidos através de tabelas, tabala 2 e 3, ou gráficos.

Tabela 2 – Equações para os coeficientes de dispersão de Pasquill & Gifford – Pluma (m) CROWL e LOUVAR, 2002.

| Pasquill-Gifford stability class | σ_y (m) | σ_z (m) |
|---|----------------------------------|----------------------------------|
| Rural conditions | | |
| A | $0.22x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$ | $0.20x$ |
| B | $0.16x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$ | $0.12x$ |
| C | $0.11x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$ | $0.08x(1 + 0.0002x)^{-1/2}$ |
| D | $0.08x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$ | $0.06x(1 + 0.0015x)^{-1/2}$ |
| E | $0.06x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$ | $0.03x(1 + 0.0003x)^{-1}$ |
| F | $0.04x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$ | $0.016x(1 + 0.0003x)^{-1}$ |
| Urban conditions | | |
| A-B | $0.32x(1 + 0.0004x)^{-1/2}$ | $0.24x(1 + 0.0001x)^{+1/2}$ |
| D | $0.22x(1 + 0.0004x)^{-1/2}$ | $0.20x$ |
| D | $0.16x(1 + 0.0004x)^{-1/2}$ | $0.14x(1 + 0.0003x)^{-1/2}$ |
| E-F | $0.11x(1 + 0.0004x)^{-1/2}$ | $0.08x(1 + 0.0015x)^{-1/2}$ |

Tabela 3 - Equações para os coeficientes de dispersão de Pasquill & Gifford – Pluma (m) CROWL e LOUVAR, 2002.

| Pasquill-Gifford stability class | σ_y (m) or σ_x (m) | σ_z (m) |
|---|---|----------------------------------|
| A | $0.18x^{0.92}$ | $0.60x^{0.75}$ |
| B | $0.14x^{0.92}$ | $0.53x^{0.73}$ |
| C | $0.10x^{0.92}$ | $0.34x^{0.71}$ |
| D | $0.06x^{0.92}$ | $0.15x^{0.70}$ |
| E | $0.04x^{0.92}$ | $0.10x^{0.65}$ |
| F | $0.02x^{0.89}$ | $0.05x^{0.61}$ |

As equações 3.7 e 3.8 representam o transporte turbulento da substância tóxica, segundo o enfoque do modelo de Pasquill-Gifford:

Para uma nuvem com ponto de liberação instantânea a uma altura Hr acima do solo:

$$\langle C \rangle(x, y, z, t) = \frac{Q_m^*}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] * A^* \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-ut}{\sigma_x}\right)^2\right] \quad (3.7)$$

$$\text{Sendo que } A = \left\{ \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-H_r}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z+H_r}{\sigma_z}\right)^2\right] \right\}$$

Onde

Q_m^* é a massa de material liberado (massa)

Pluma com liberação contínua e estacionária a uma altura H_r do solo e vento movendo na direção "x" com velocidade constante "u"

$$\langle C \rangle(x, y, z) = \frac{Q_m}{2\pi\sigma_y\sigma_z u} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] * \left\{ \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-H_r}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z+H_r}{\sigma_z}\right)^2\right] \right\} \quad (3.8)$$

Onde:

Q_m é a vazão mássica de liberação de massa (massa/tempo)

O modelo de Pasquill-Gifford se aplica somente a dispersões de empuxo neutro de gases, em que prevalece a dispersão turbulenta do gás sobre os efeitos gravitacionais (o que não ocorre em gases densos, que tendem a descer antes de se diluir). Este modelo é tipicamente válido para distâncias de 0.1 a 10 km do ponto da liberação.

3.2. Modelo do “*Bureau of Mines*”

Esse modelo foi um dos primeiros a introduzir o conceito de *gás denso* em dispersões. Um gás denso é definido como qualquer gás cuja densidade é maior do que a densidade do ar ambiente através do qual ele está sendo disperso. Isso pode ocorrer devido ao massa molar da molécula ser maior do que a do ar ou devido ao fato de que a liberação de certos gases diminui sua temperatura devido à autorrefrigeração (LEES, 1995).

Enquanto para gases neutros o coeficiente de dispersão vertical σ_z nas equações de Pasquill-Gifford tende a ser a metade do valor do coeficiente de dispersão horizontal, o modelo de *Bureau of Mines* indica que para gases densos,

$$\sigma_z = 0,2 \sigma_y \quad (3.9)$$

onde σ_z e σ_y são os coeficientes de dispersão na direção perpendicular ao vento e na direção vertical, respectivamente. As outras considerações e as equações empregadas no modelo Pasquill-Gifford são também utilizadas no modelo do *Bureau of Mines*.

3.3. Modelo de Britter & McQuaid

Esse modelo foi desenvolvido através de uma análise dimensional e de correlações de dados experimentais de dispersão de gases densos. Esse modelo se aplica melhor a liberações instantâneas ou contínuas ao nível do solo. Supõe-se, nesse modelo, que a liberação ocorreu à temperatura ambiente e sem formação de aerossol (gotículas líquidas). Descobriu-se que a estabilidade atmosférica produz um efeito pequeno na dispersão de gases densos, e, por isto, não faz parte deste modelo. A

maioria dos dados utilizados neste vem de testes de dispersão em áreas rurais remotas e terrenos planos. Por essa razão, os resultados não podem ser aplicados a áreas onde o efeito da irregularidade do terreno é significativa *CROWL e LOUVAR, 2002*.

O modelo inclui, no caso da nuvem, a especificação do volume inicial V_0 , ou, no caso da pluma, o fluxo volumétrico, q_0 . É necessária, também, a especificação da duração da liberação, R_d , e da densidade inicial do gás, ρ_0 . Também é necessária a velocidade do vento a uma altura de 10 metros do solo, u , da distância na direção do vento, x , e da densidade do ar no ambiente, ρ_a .

A primeira etapa é determinar o fator de empuxo inicial, g_0 :

$$g_0 = g(\rho_0 - \rho_a) / \rho_a \quad (3.10)$$

onde g é a aceleração da gravidade (comprimento/tempo²).

Calculam-se também as dimensões características da nuvem e da pluma:

Para liberação instantânea:

$$D_c = \left(\frac{q_0}{u} \right)^{1/2} \quad (3.11)$$

Para liberação contínua:

$$D_i = V_0^{1/3} \quad (3.12)$$

O modelo dispõe, então, de um critério para avaliar se o gás realmente necessita de uma representação de gás denso, dada pelas Equações 3.13 e 3.14:

Para liberação instântanea, gás denso se

$$\frac{\sqrt{g_0 V_0}}{uD_i} \geq 0,20 \quad (3.13)$$

Para liberação contínua, gás denso se

$$\left(\frac{g_0 q_0}{u^3 D_c} \right)^{1/3} \geq 0,15 \quad (3.14)$$

Se esses critérios forem satisfeitos, então as correlações entre grupos adimensionais do modelo de Britter-McQuaid podem ser utilizadas para estimar as concentrações médias no tempo na direção do vento. Os gráficos das figuras 2 e 3 e as tabelas 4 e 5 podem ser usados para obtenção desses grupos adimensionais.

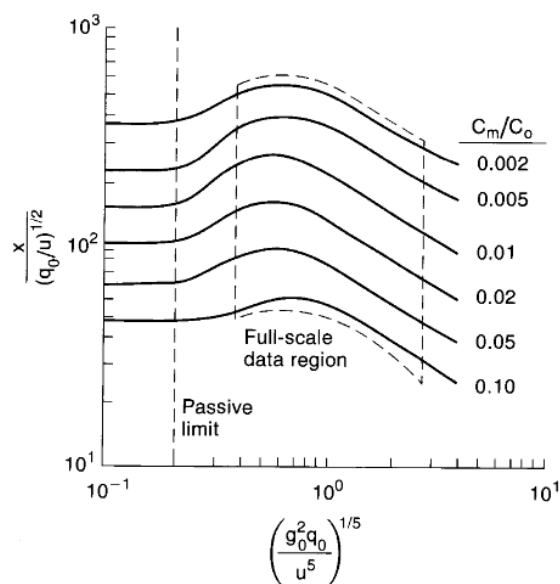


Figura 2 - Correlação de Britter e McQuaid – Dispersão tipo pluma para gás denso, CROWL e LOUVAR, 2002.

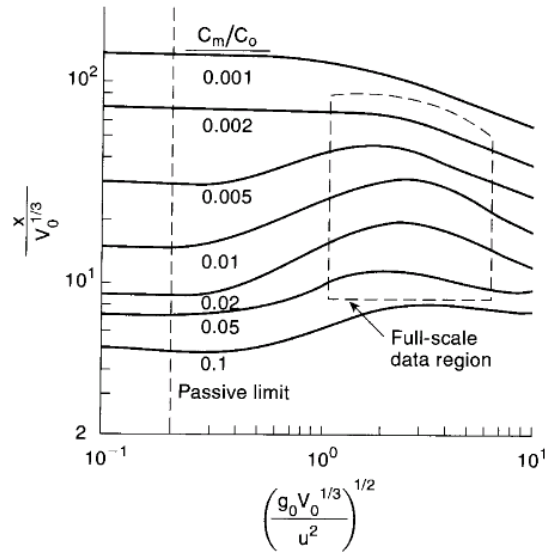


Figura 3 - Correlação de Britter e McQuaid – Dispersão tipo pluma para gás denso, CROWL e LOUVAR, 2002.

Tabela 4 –Equações usadas para aproximação das curvas de correlação-Pluma CROWL e LOUVAR, 2002.

| Concentration ratio (C_m/C_o) | Valid range for $\alpha = \log\left(\frac{g_0^2 q_0}{u^5}\right)^{1/5}$ | $\beta = \log\left[\frac{x}{(q_0/u)^{1/2}}\right]$ |
|--------------------------------------|--|--|
| 0.1 | $\alpha \leq -0.55$ | 1.75 |
| | $-0.55 < \alpha \leq -0.14$ | $0.24\alpha + 1.88$ |
| | $-0.14 < \alpha \leq 1$ | $0.50\alpha + 1.78$ |
| 0.05 | $\alpha \leq -0.68$ | 1.92 |
| | $-0.68 < \alpha \leq -0.29$ | $0.36\alpha + 2.16$ |
| | $-0.29 < \alpha \leq -0.18$ | 2.06 |
| | $-0.18 < \alpha \leq 1$ | $-0.56\alpha + 1.96$ |
| 0.02 | $\alpha \leq -0.69$ | 2.08 |
| | $-0.69 < \alpha \leq -0.31$ | $0.45\alpha + 2.39$ |
| | $-0.31 < \alpha \leq -0.16$ | 2.25 |
| | $-0.16 < \alpha \leq 1$ | $-0.54\alpha + 2.16$ |
| 0.01 | $\alpha \leq -0.70$ | 2.25 |
| | $-0.70 < \alpha \leq -0.29$ | $0.49\alpha + 2.59$ |
| | $-0.29 < \alpha \leq -0.20$ | 2.45 |
| | $-0.20 < \alpha \leq 1$ | $-0.52\alpha + 2.35$ |
| 0.005 | $\alpha \leq -0.67$ | 2.40 |
| | $-0.67 < \alpha \leq -0.28$ | $0.59\alpha + 2.80$ |
| | $-0.28 < \alpha \leq -0.15$ | 2.63 |
| | $-0.15 < \alpha \leq 1$ | $-0.49\alpha + 2.56$ |
| 0.002 | $\alpha \leq -0.69$ | 2.6 |
| 0.002 | $-0.69 < \alpha \leq -0.25$ | $0.39\alpha + 2.87$ |
| 0.002 | $-0.25 < \alpha \leq -0.13$ | 2.77 |
| 0.002 | $-0.13 < \alpha \leq 1$ | $-0.50\alpha + 2.71$ |

Tabela 5 - Equações usadas para aproximação das curvas de correlação-Nuvem CROWL e LOUVAR, 2002.

| Concentration ratio (C_m/C_o) | Valid range for $\alpha = \log\left(\frac{g_o V_o^{1/3}}{u^2}\right)^{1/2}$ | $\beta = \log\left(\frac{x}{V_o^{1/3}}\right)$ |
|--------------------------------------|--|--|
| 0.1 | $\alpha \leq -0.44$ | 0.70 |
| | $-0.44 < \alpha \leq 0.43$ | $0.26\alpha + 0.81$ |
| | $0.43 < \alpha \leq 1$ | 0.93 |
| 0.05 | $\alpha \leq -0.56$ | 0.85 |
| | $-0.56 < \alpha \leq 0.31$ | $0.26\alpha + 1.0$ |
| | $0.31 < \alpha \leq 1.0$ | $-0.12\alpha + 1.12$ |
| 0.02 | $\alpha \leq -0.66$ | 0.95 |
| | $-0.66 < \alpha \leq 0.32$ | $0.36\alpha + 1.19$ |
| | $0.32 < \alpha \leq 1$ | $-0.26\alpha + 1.38$ |
| 0.01 | $\alpha \leq -0.71$ | 1.15 |
| | $-0.71 < \alpha \leq 0.37$ | $0.34\alpha + 1.39$ |
| | $0.37 < \alpha \leq 1$ | $-0.38\alpha + 1.66$ |
| 0.005 | $\alpha \leq -0.52$ | 1.48 |
| | $-0.52 < \alpha \leq 0.24$ | $0.26\alpha + 1.62$ |
| | $0.24 < \alpha \leq 1$ | $0.30\alpha + 1.75$ |
| 0.002 | $\alpha \leq 0.27$ | 1.83 |
| | $0.27 < \alpha \leq 1$ | $-0.32\alpha + 1.92$ |
| 0.001 | $\alpha \leq -0.10$ | 2.075 |
| | $-0.10 < \alpha \leq 1$ | $-0.27\alpha + 2.05$ |

3.4. Modelo de van Ulden

Os modelos de dispersão de van Ulden para gases densos foram tentativas de se considerar o efeito da gravidade agindo sobre o gás emitido pela fonte, nos instantes iniciais da dispersão. Após estes instantes, e depois que o gás se misturou ao ar atmosférico, a densidade da nuvem diminui, e, para quantificar o restante do processo de dispersão, pode ser utilizado um modelo de empuxo neutro ou dispersão Gaussiana como o de Pasquill-Gifford.

No modelo de van Ulden para emissões instantâneas, considera-se que a nuvem tem forma de um cilindro, em que a altura e o raio variam com o tempo. A velocidade com que se move a frente de gás é considerada igual à de uma frente de fluido que

se desloca quando uma represa arrebenta. Na figura 4a, mostra-se esquematicamente a evolução da nuvem segundo este modelo.

No modelo de van Ulden para emissões contínuas, utiliza-se um enfoque parecido com aquele utilizado nas emissões instantâneas. Simplifica-se a geometria da pluma formada pelo gás denso, ao se considerar que sua seção transversal é retangular. A altura desta seção retangular é H e sua semi-largura é L . Considera-se, ainda, segundo a figura 4b, que o “retângulo” que compõe a seção transversal da pluma no tempo t_1 viajará segundo a direção desta, e se transformará, no tempo t_2 , em outro “retângulo” mais distante da fonte da pluma, de altura e largura diferentes daquelas do tempo t_1 .

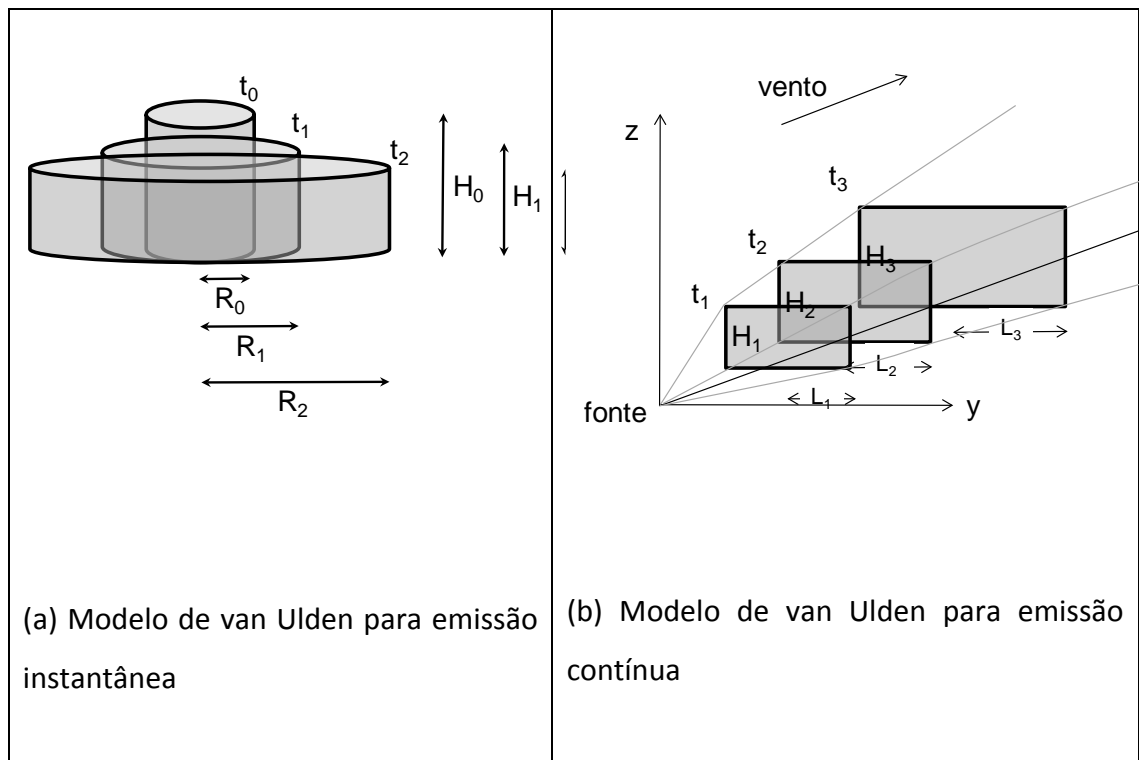


Figura 4 – Em (a) Modelo de van Ulden para emissão instantânea e em (b) Modelo de van Ulden para emissão contínua

Segundo o trabalho de van Ulden para emissões contínuas, a variação da largura do “retângulo” com o tempo, durante a etapa em que os efeitos gravitacionais são preponderantes em relação aos de dispersão, é dada pela equação:

$$\frac{dL}{dt} = u_y = \frac{c_E}{L^{1/2}} \left[\frac{g S_0 / 2}{S_0 / S + \rho_a / (\rho_0 - \rho_a)} \right]^{1/2} \quad (3.6)$$

Em que $S = 2LH$ (área da seção transversal da pluma), c_E é uma constante adimensional derivada do trabalho experimental de van Ulden (o autor recomenda utilizar $c_E \sim 1$) ρ_a é a densidade do ar, ρ_0 a densidade do gás na fonte e S_0 a área da seção transversal da fonte (= do orifício por onde sai o gás). O tempo t é uma variável que representa, na verdade, a distância x a partir da fonte, e não significa, necessariamente, que as características da pluma variam com o tempo.

A vazão volumétrica de gás (W_0) que sai da fonte é

$$W_0 = S_0 u \quad (3.7)$$

em que u é a velocidade média do vento (aqui admite-se que a pluma percorre a direção x com a mesma velocidade do vento). A área da seção transversal e a altura da pluma relacionam-se à sua largura pelas equações

$$S/S_0 = (L/L_0)^\gamma \quad (3.8)$$

$$H/H_0 = (L/L_0)^{\gamma-1} \quad (3.9)$$

e a densidade reduzida da pluma será função de L (e, portanto, função da distância na direção do vento, que é x).

$$\Delta'_c = (\rho_c - \rho_a) / \rho_c = \left[1 + \frac{\rho_a}{\rho_0 - \rho_a} \left(\frac{L}{L_a} \right)^\gamma \right]^{-1} \quad (3.10)$$

em que ρ_c é a densidade da pluma ou nuvem e γ é o coeficiente de mistura do gás denso na superfície da pluma. Quando o gás denso praticamente não se mistura (o que é uma suposição razoável durante a etapa de predominância dos efeitos gravitacionais sobre a pluma), $\gamma = 0$. A densidade reduzida no caso em que $\gamma = 0$, portanto, permanece igual àquela da fonte, ou seja, $\Delta'_c = \Delta'_{CO}$. Neste caso, tem-se a variação de largura com o tempo dada por

$$\frac{dL}{dt} = u_y = \left(\frac{gS_0\Delta'_{CO}}{2L} \right)^{1/2} \quad (3.11)$$

Ao se resolver a equação diferencial ordinária acima, com a condição inicial $L(t = 0) = L_0$, tem-se a variação da semi-largura L com o tempo:

$$L(t)^{3/2} - L_0^{3/2} = \frac{3}{2} \left(\frac{gS_0\Delta'_{CO}}{2} \right)^{1/2} t \quad (3.12)$$

O critério para se determinar o fim da etapa de predominância gravitacional e o início da etapa de dispersão de empuxo neutro baseia-se na determinação do ponto em que a energia relacionada à turbulência (que tende a diluir a pluma) é igual à diferença entre as energias potenciais gravitacionais da pluma e do ar (que tendem a fazer a pluma descer):

$$2\rho_a u_*^2 = 1/2(\rho_c - \rho_a)gH = 1/2\rho_c u_y^2 \quad (3.13)$$

Na equação anterior, u_* é a velocidade de atrito, que é uma velocidade característica do vento, e que varia entre 3 e 12 % da velocidade média do vento u . A velocidade de atrito é definida por

$$u_* = (\tau/\rho)^{1/2} \quad (3.14)$$

em que τ é o fluxo médio de momento transferido pelo vento ao solo e ρ a densidade do ar. Em geral, a velocidade de atrito é tabelada juntamente com a rugosidade da superfície do solo. Frequentemente, é tomada como 1/10 da velocidade média do vento. A condição de transição entre as duas etapas é, considerando a densidade na fronteira da pluma (ρ_e , de “edge”), se a densidade nesta região é considerada praticamente igual à do ar, ou seja, $\rho_e \approx \rho_a$, a condição de transição pode ser simplificada:

$$u_y = 2u_* \quad (3.15)$$

Capítulo 4 – O Estudo de Caso: dispersão de cloro gasoso

4.1. Descrição do Acidente

Na manhã do dia 14 de agosto de 2002, perto da cidade de Festus, Missouri, USA, um tanque de armazenamento e transporte de cloro, estacionado dentro da fábrica DPC Festus, liberou cerca de 48 mil libras (cerca de 22000 Kg) de cloro por cerca de 3 horas. Apesar da direção do vento no momento do acidente ter favorecido o deslocamento da pluma de cloro para longe da região povoada, 63 pessoas procuraram o hospital local com desconforto respiratório e centenas de pessoas foram aconselhadas a ficarem refugiadas dentro de casa por cerca de 4 horas. Além disso, o tráfego na rodovia Interestadual 55 (Interstate 55) foi interrompido por 1 hora e meia e 3 funcionários da empresa tiveram pequenas queimaduras na pele devido a exposição ao cloro no momento da limpeza do local.

O acidente começou com uma fratura numa mangueira que conectava um tanque, contendo cerca de 80 mil libras (cerca de 36000 kg) de cloro em estado líquido, ao sistema de envasamento. Essa fratura iniciou uma sequência de eventos que levou ao vazamento de cerca de 48 mil libras de Cl_2 , (cerca de 22000 kg), que foi liberado para a atmosfera sem controle por cerca de 3 horas.

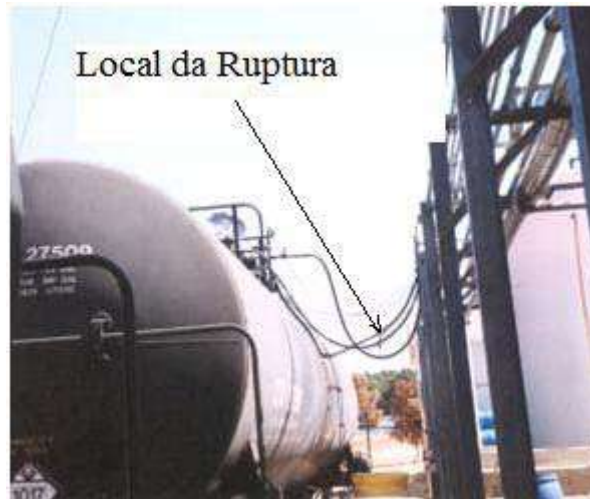


Figura 5 – Tanque de armazenamento de cloro

Os departamentos responsáveis pela avaliação do acidente constataram que podem ser várias as causas do rompimento da mangueira. Uma delas é que as especificações desta não eram adequadas ao processo de descarga do cloro. Outra provável causa é que a presença de umidade indesejada no sistema de descarga do cloro tenha causado corrosão nas tubulações; mesmo pequenas quantidades de umidade podem causar sérios problemas de corrosão nas tubulações de aço carbono (Investigation Report - Chlorine Release, 2003)

A fábrica DPC Festus é localizada a aproximadamente 56 km ao sul da cidade de St. Louis e quase 5 km ao sul de Festus e Crystal City, pequenas cidades com população total de 14000 pessoas. Estima-se que cerca de 1500 pessoas vivem num raio de 1,6 km a partir da fábrica. Apesar de 200 pessoas morarem logo a noroeste da DPC Festus, no estacionamento para *trailers* denominado *Blue Fountain*, no início da dispersão o vento estava entre a direção leste e sudeste, na direção do terreno das empresas *Goodwin Brothers Construction* e *Intermodal Tire Services*, como mostrado na figura 6.

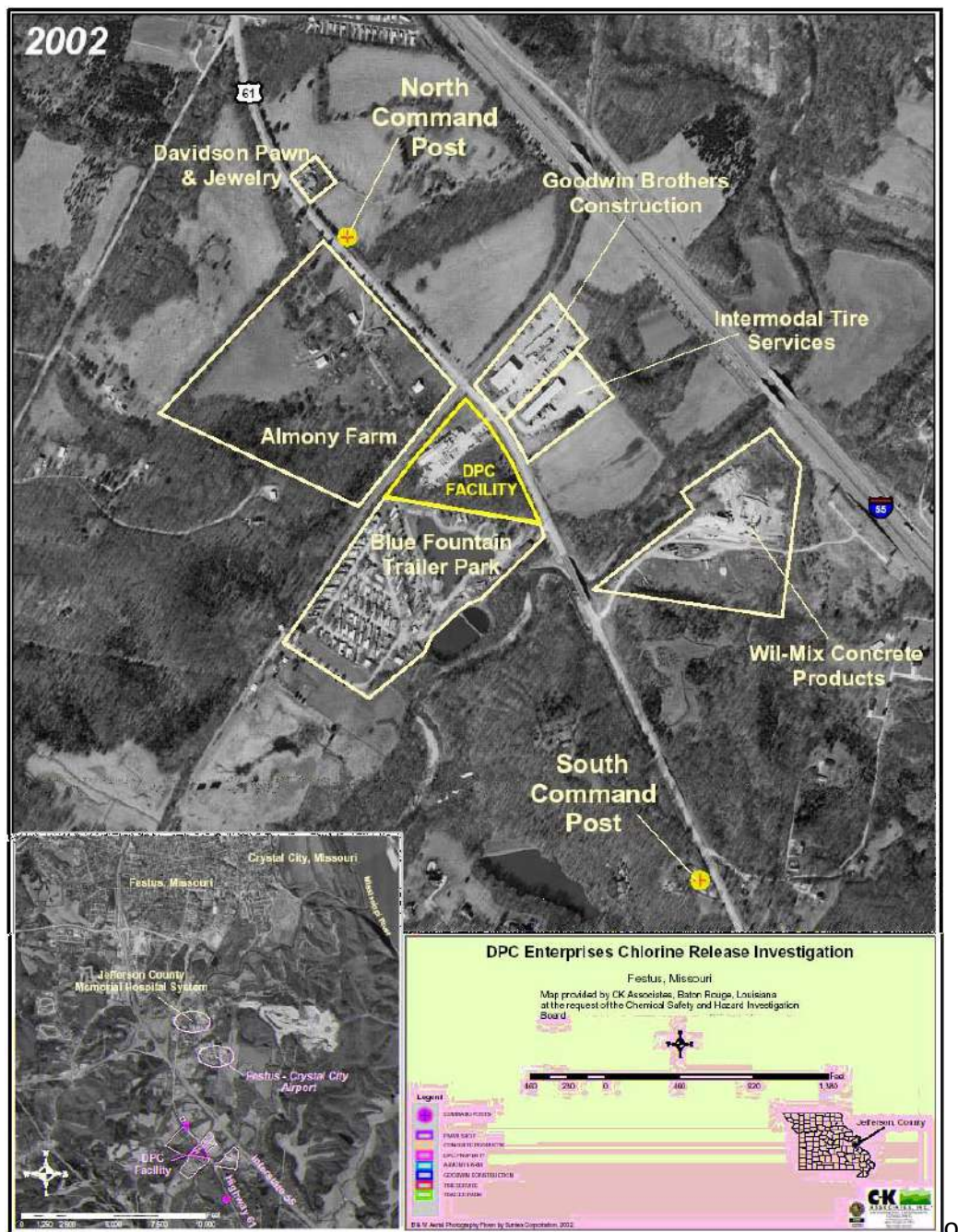


Figura 6 - Mapa da região próxima a DPC Festus

Como se pode visualizar no mapa da figura 6, existem algumas residências e negócios em torno da DPC Festus. Além dos cerca de 100 lares na *Blue Fountain*, existem as empresas *Goodwin Brothers Construction* e a *Intermodal Services* localizadas a cerca de 100 metros a leste da fábrica, nas quais havia, em cada uma, cerca de 18 funcionários que estavam trabalhando na hora do acidente. Uma fazenda está localizada ao norte da unidade da DPC, separada somente pela ferrovia.

A rodovia Interestadual 55 (Interstate 55) está localizada a menos de 800 m da DPC Festus.

Dentro de um raio de 1,6 km a partir da DPC Festus existem várias residências e outros estabelecimentos como o hospital e a escola local, além do Aeroporto de Festus-Crystal City.

DPC Festus é uma empresa pequena de envasamento, distribuição de Cl₂ e de fabricação de água sanitária, que emprega 12 funcionários. A empresa funciona de segunda a sexta, das 6h até as 16h. No final de cada expediente, um funcionário é responsável por fechar todas as válvulas dos tanques de armazenamento manualmente e encaminhar o cloro restante no sistema de tubulações para o processo de fabricação de água sanitária. O sistema é deixado sob pressão negativa, sendo que as mangueiras de transferência de cloro continuam conectadas ao tanque de armazenamento durante a noite. Por último, fecham-se as válvulas de segurança automaticamente. (Investigation Report - Chlorine Release, 2003).

Acredita-se que a velocidade do vento no momento do acidente estivesse entre 3 e 5 mph (1,3 m/s e 2,2 m/s) e que a pluma de Cl₂ tenha se dispersado entre as direções leste e sudeste, na direção de *Goodwin Brothers Construction* e a *Intermodal Services* e que possa ter se deslocado para o vizinho *Blue Fountain* nos momentos de ausência de vento.

Tabela 6 - Parâmetros do acidente segundo o relatório investigativo

| <i>Parâmetros</i> | <i>Valores/Informações segundo o relatório</i> |
|-------------------------------------|--|
| Substância vazada | Cl ₂ |
| Quantidade vazada | 48000 lbm, aproximadamente 21770 kg |
| Tempo de vazamento | Aproximadamente 3 horas |
| Densidade de Cl ₂ vazado | 2,5 vezes a do ar ($\rho_{\text{ar}} = 1,22 \text{ kg/m}^3$) |
| Velocidade do vento | Entre 3 e 5 mph (1,3 m/s e 2,2 m/s) e possivelmente nula |
| Diâmetro da mangueira rompida | 0.025 m |
| Condições relevantes do acidente | Dia, verão, área rural |

4.2. Características e Toxicologia do Cloro

O nome da substância cloro vem do latim “*clorum*”, que significa verde, nome dado pela sua cor amarelo-esverdeada quando no estado gasoso. Foi preparado pela primeira vez em 1774, por Carl Wilhelm Scheele (1742-1786), que o produziu ao fazer reagir ácido clorídrico com dióxido de manganês. Scheele considerava-o como sendo uma substância composta. Quase 40 anos depois, em 1810, Humphry Davy (1778-1829) mostrou que ele não podia ser decomposto e que o próprio ácido clorídrico era, na verdade, um composto de hidrogênio e cloro. Reconhecendo-o como um novo elemento, deu a ele o nome de cloro (OxyChem Chlorine Handbook, Occidental Chemical Corporation, 2006).

O cloro é uma substância química tóxica com odor irritante encontrada em temperatura ambiente no estado gasoso. No estado puro, na sua forma biatômica (Cl_2) e em condições normais de temperatura e pressão, é duas vezes e meia mais pesado que o ar, por isso tende a flutuar próximo do solo quando liberado (Investigation Report - Chlorine Release, 2003).

O gás Cl_2 pode ser liquefeito por aplicação de pressão a temperaturas reduzidas, para facilitar seu armazenamento e transporte. Em geral, é armazenado em cilindros de 150 libras (68 kg), recipientes de 1 ton ou em tanques de 55 a 90 ton. A liberação e vaporização de cloro líquido a partir da sua forma pressurizada normalmente condensa água contida no ar, criando uma neblina visível (OxyChem Chlorine Handbook, Occidental Chemical Corporation, 2006).

Quando inalado em altas concentrações, o gás de cloro provoca sufocamento, dores no peito e na garganta e edema dos pulmões. Em concentrações de aproximadamente 1000ppm pode ser fatal em pouco tempo de exposição. De acordo com o National Institute for Occupational Safety and Health (NIOSH, 2003), o gás cloro é classificado como “imediatamente perigoso a vida ou a saúde” em concentrações em torno de 10 ppm. Dependendo de certos fatores, como volume, terreno, temperatura, umidade, estabilidade atmosférica e velocidade e direção do vento, a pluma de gás cloro pode viajar vários metros em um curto período de tempo, em concentração acima da segura para a saúde (Investigation Report - Chlorine Release, 2003).

O cloro no estado gasoso pode ser detectado pelo odor em concentrações abaixo de 1ppm. A exposição ao cloro pode ocorrer via inalação, contato com a pele ou com os olhos. Em caso de inalação de grande quantidade de cloro gás, pode haver desde irritação das membranas mucosas dos olhos, nariz, garganta e pulmão até a morte, dependendo do tempo de exposição e da concentração do Cl_2 . Na tabela 3 são apresentadas algumas consequências da inalação de cloro em diferentes concentrações (Ellenhorn and Barceloux, 1988).

Tabela 7 – Efeitos causados ao homem em diferentes concentrações de Cl₂

| Concentração de Cl₂ | Efeitos sentidos após inalação |
|---------------------------------------|---------------------------------------|
| 1-3 ppm | Irritação de membranas mucosas leve |
| 5-15 ppm | Irritação moderada na respiração |
| 30 ppm | Dor no peito imediata, tosse e vômito |
| 40-60 ppm | Pneumonite tóxica e edema pulmonar. |
| 430 ppm | Letal após cerca de 30 minutos |
| 1000 ppm | Morte em poucos minutos |

É importante ressaltar que apesar da inalação ser a primeira forma de exposição, o contato direto da pele com o gás ou líquido de cloro pode resultar em queimaduras químicas, uma vez que o cloro reage com a umidade da pele. Além disso, as baixas temperaturas associadas à vaporização do cloro líquido pressurizado podem causar queimaduras provocadas pelo frio (Investigation Report - Chlorine Release, 2003).

Existem, ainda, outros tipos de dados de toxicologia, que consideram também o tempo de exposição e as consequências causadas pela exposição a uma substância. Dados de ERPG ('Emergency Response Planning Guidelines'), por exemplo, que relacionam concentrações de diversas substâncias tóxicas e gasosas a diferentes graus de consequências à saúde humana. Assim, ERPG1 é a concentração máxima no ar a que um indivíduo pode ficar exposto por 1 hora sem apresentar efeitos adversos à substância. ERPG2 é a concentração máxima no ar a que um indivíduo pode ficar exposto por 1 hora sem apresentar efeitos irreversíveis à saúde. ERPG3 é a concentração máxima no ar a que um indivíduo pode ficar exposto por 1 hora sem apresentar ou desenvolver efeitos que ameacem a vida.

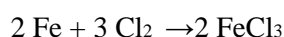
Tabela 8 - Valores do ERPG do cloro em ppm. (CROWL e LOUVAR, 2002)

| <i>Substância</i> | <i>ERPG1</i> | <i>ERPG2</i> | <i>ERPG3</i> |
|------------------------|--------------|--------------|--------------|
| Cloro, Cl ₂ | 1 | 3 | 20 |

4.3 - Características de Corrosão do Aço-Carbono pelo Cloro

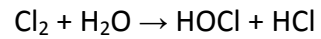
O cloro seco é definido como cloro líquido ou gasoso que pode conter uma pequeníssima quantidade de água, mas que está dissolvida na fase líquida ou gasosa. Quando nem toda a água está dissolvida no cloro, o excesso de água forma uma segunda fase. É essa fase rica em água que cria problemas de corrosão dentro do sistema com cloro seco. À pressão ambiente, o cloro seco deve conter menos de 50 ppm de água (Investigation Report - Chlorine Release, 2003).

O aço carbono é o material mais comumente usado na construção de sistemas de tubulação que transportam cloro seco. O ferro presente no aço carbono pode reagir com o cloro seco segundo a reação:



Entretanto, o produto dessa reação, o cloreto férrico, forma uma camada de passivação na superfície do aço, a qual protege o ferro abaixo desta de sofrer ataque pelo cloro. O aço carbono é resistente à corrosão do cloro desde que maiores concentrações de água ou maiores temperaturas não destruam esta camada protetora. O ataque do cloro ao aço depende da existência de uma fase rica em água ou de um aumento na temperatura. Em qualquer caso, o cloreto férrico é dissolvido, e a solução com ele formada é um eletrólito e um oxidante forte.

Além disto, a fase rica em água não somente dissolve a camada protetora de cloreto férrico, mas também forma um meio ácido pela reação do cloro com água. A reação entre cloro e água forma ácido hipocloroso e ácido clorídrico:



Assim, os ácidos e o cloreto férrico dissolvido formam uma solução que pode efetivamente corroer o aço carbono. Acredita-se que, no caso do acidente na DPC Enterprises, a corrosão da mangueira metálica utilizada para descarregar o cloro de um vagão-tanque para o sistema de envase de cloro, aliada à vibração desta mangueira causada pelo transporte do fluido, tenham causado a ruptura desta (Investigation Report - Chlorine Release, 2003).

Capítulo 5 - Programa Computacional

Neste capítulo, será apresentado o programa computacional desenvolvido com o auxílio do software Matlab® 7.6.0 (2008). O programa inclui os modelos fonte e os modelos de dispersão da substância gasosa. A verificação dos programas foi realizada a partir de exemplos resolvidos disponíveis no livro Louvar e Crawl turbulenta (CROWL e LOUVAR, 2002). Esses modelos foram discutidos nos capítulos 2 e 3.

Neste trabalho, os programas permitiram o cálculo da distância na direção do vento que apresentava uma determinada concentração de cloro previamente escolhida, para simulação do acidente ocorrido na fábrica da DPC Enterprises, discutido no Capítulo 4. Calculou-se, através dos modelos de dispersão apresentados no Capítulo 3, a que distância a pluma ou nuvem atingia a concentração de 10 ppm (aproximadamente 29 mg/m³), porque, segundo o relatório investigativo, esta concentração já apresenta riscos à saúde.

As informações da tabela 6 foram usadas na obtenção desses resultados. Na Figura 7 apresenta-se a interface do programa computacional desenvolvido para este trabalho.

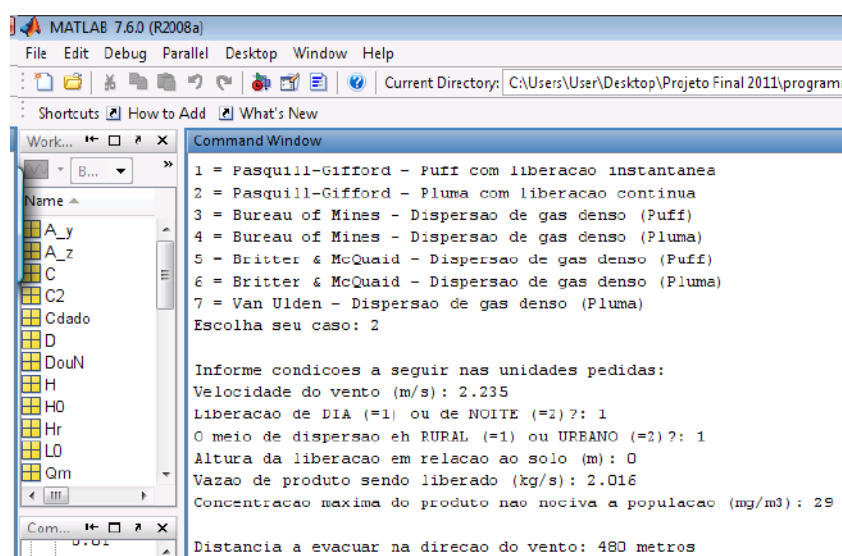


Figura 7 - Visualização da programação do Modelo de Pasquill & Gifford para dispersão contínua de gases com dados do relatório investigativo.

Na figura 7, é possível visualizar a interface do programa para o usuário, em que as seis primeiras linhas são fornecidas a ele escolher o modelo de dispersão (Pasquill & Gifford, *Bureau of Mines*, Britter & McQuaid ou van Ulden) e também o tipo de dispersão (nuvem ou pluma). Posteriormente, o usuário deverá entrar com as informações pedidas, nas unidades indicadas, sobre o caso que deseja simular. O programa calcula a distância na direção do vento em que é possível encontrar a concentração no centro da pluma ou nuvem, em mg/m^3 , fornecida pelo usuário, exceto para o modelo de van Ulden. Neste caso, o modelo calcula a distância em que a pluma deixa de sofrer efeitos gravitacionais e passa a se dispersar segundo um modelo gaussiano, como o de Pasquill-Gifford.

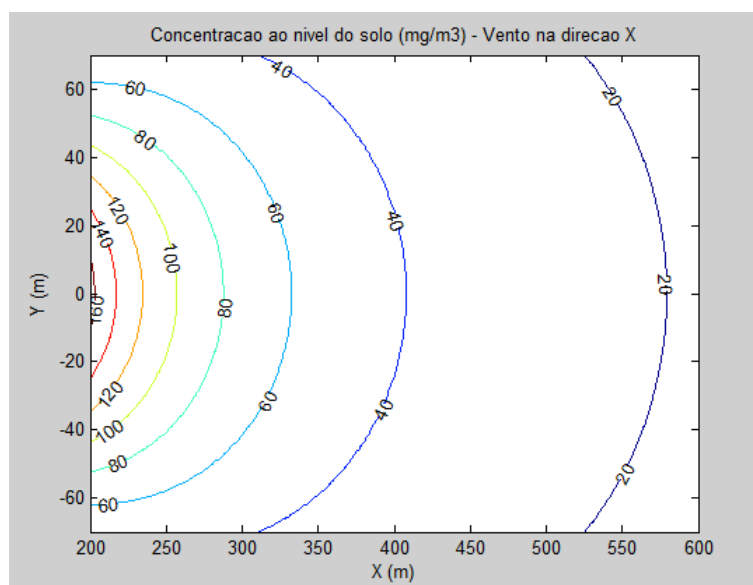


Figura 8 - Isopleta de concentração de Cl_2 nas direções y e x , sendo z (altura em relação ao nível do solo) igual a 0 para liberação contínua

Além disso, o programa fornece as isopletas da concentração de Cl_2 (curvas de mesma concentração, mostradas na Figura 8 em função dos eixos x e y , para z igual a 0, ou seja, ao nível do solo). Esta é uma informação importante, uma vez que existem

estabelecimentos ao redor da unidade da DPC Festus que não estavam na exata direção do vento, mas em que houve ocorrências de pessoas afetadas pelo cloro.

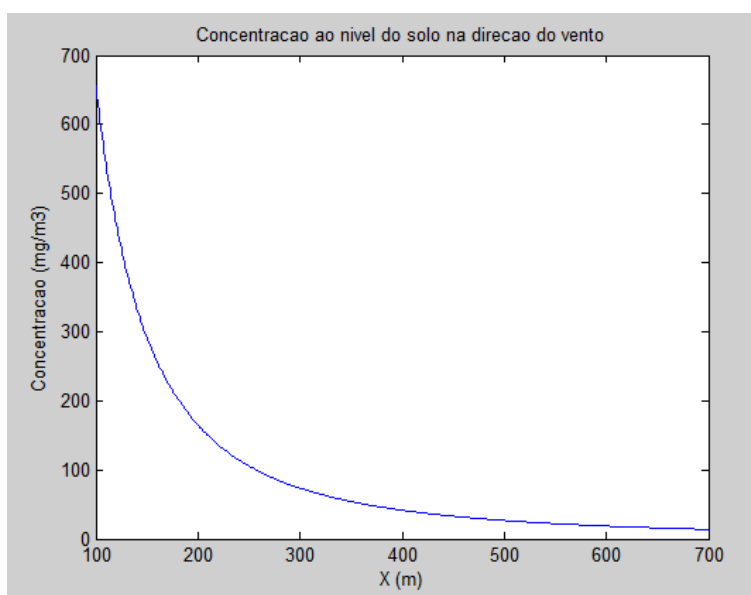


Figura 9 - Gráfico Concentração de Cl₂ ao nível do solo versus distância na direção do vento, x – Modelo de Pasquill & Gifford

Finalmente, o programa apresenta gráficos de concentração de Cl₂ no centro da pluma, ao nível do solo, relacionada à distância na direção do vento, x. Com estes, é possível avaliar o risco em cada local a determinada distância da fonte da liberação de cloro. As Figuras 8 e 9 representam os resultados para a dispersão de cloro utilizando o modelo Pasquill-Gifford para plumas, na velocidade do vento igual a 2,2 m/s. Pode-se simular também, através do programa, a dispersão do tipo nuvem.

Nas opções 5 e 6, referentes ao modelo de Britter-McQuaid, o gráfico concentração x distância gerado como resposta não é contínuo, pois as equações utilizadas para este caso geram valores de concentrações somente em determinados valores da distância. Neste caso, o usuário obterá como resposta do programa a concentração máxima onde o modelo ainda é válido e a distância na direção do vento em que ocorre essa concentração.

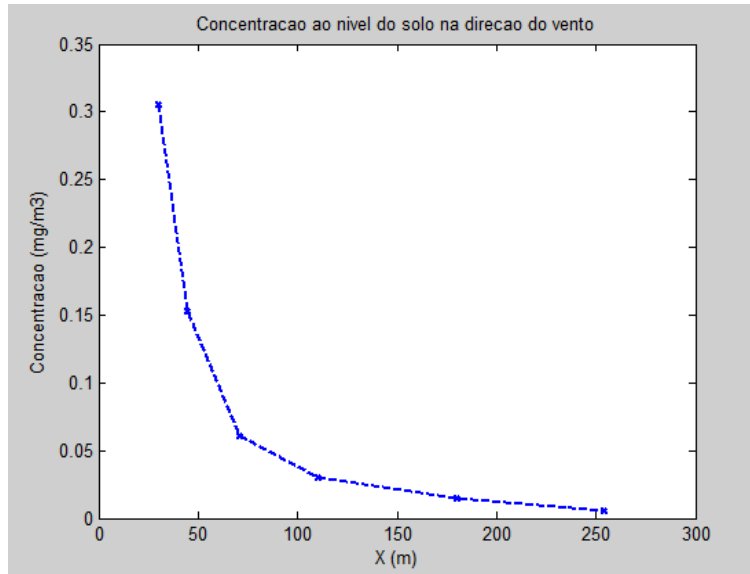


Figura 10 - Gráfico Concentração de Cl₂ ao nível do solo vs distância na direção do vento, x – Modelo de Britter-McQuaid, dispersão pluma

Contudo, se o usuário utilizar o modelo de Van Ulden, o programa calculará a distância de transição entre os regimes gravitacional e turbulento, a largura e a altura da pluma até a distância de transição, na direção do vento, conforme mostrado na Figura .

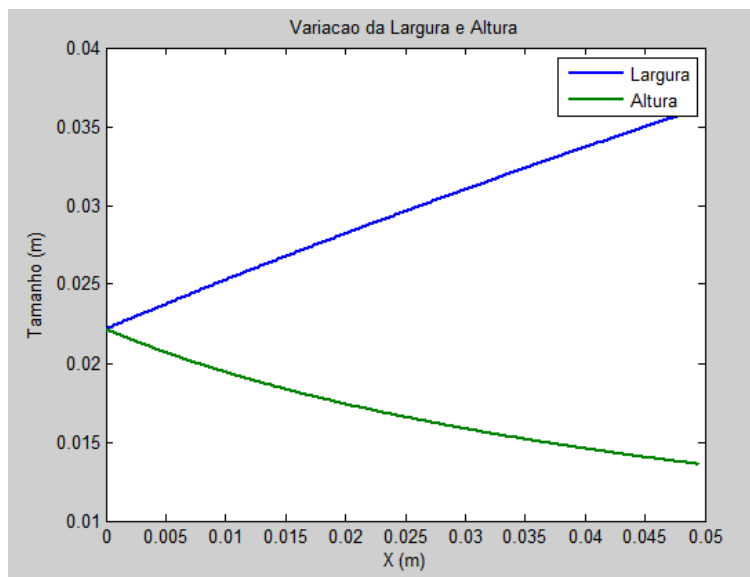


Figura 11 - Variação de largura e altura nos primeiros instantes da dispersão do Cl₂ vs distância na direção do vento segundo Modelo de van Ulden - PLuma

Capítulo 6 - Resultados e Discussão

Neste capítulo, serão apresentados os resultados para a simulação da liberação e da dispersão de cloro durante o acidente na DPC Enterprises, obtidos através do programa computacional desenvolvido com o auxílio do software Matlab® 7.6.0 (2008). Os modelos de dispersão utilizados neste trabalho são os de Pasquill-Gifford, Britter-McQuaid (CROWL e LOUVAR, 2002), *Bureau of Mines* e van Ulden (LEES, 1995). As rotinas criadas encontram-se no Anexo B. A verificação da programação foi realizada utilizando-se exemplos resolvidos do CROWL e LOUVAR (2002). Por fim, apresentam-se as comparações de todos os resultados obtidos através dos diferentes modelos de dispersão utilizados.

Como descrito anteriormente, estes modelos incluem duas condições de dispersão, em pluma ou em nuvem. Apesar de o caso de dispersão da DPC Festus ser mais parecido com uma pluma, devido ao fato de o vazamento ter acontecido por cerca de 3 horas continuamente, a dispersão também será considerada como uma nuvem, uma vez que esta dispersão seria intermediária entre uma dispersão contínua e uma instantânea. Para os dois casos, serão consideradas três velocidades do vento distintas: 0,05 m/s, 1,3 m/s e 2,2 m/s, que estão na faixa de velocidades do vento mencionadas pelo relatório da CSB. (Investigation Report - Chlorine Release, 2003).

Acredita-se que a hipótese da pluma seja mais correta, uma vez que o critério de determinação do tipo de vazamento do modelo de Britter-McQuaid (CROWL e LOUVAR, 2002) indica a validade desta hipótese. Segundo este critério, o grupo adimensional Π , presente na Equação 6.1 é calculado. Se o valor for maior ou igual a 2,5 considera-se a dispersão como contínua; se for menor ou igual a 0,6, considera-se a dispersão como instantânea.

$$\Pi = \frac{u.R_d}{x} \quad (6.1)$$

Na Equação (6.1),

u é a velocidade do vento a 10 m de elevação (comprimento/tempo),

R_d é o tempo de duração do vazamento, e

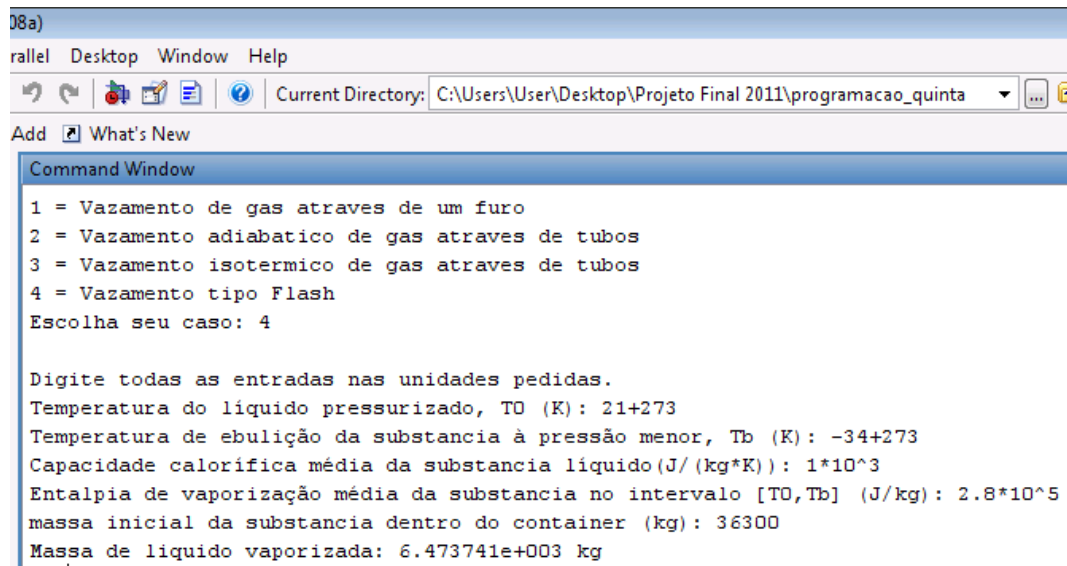
x é a distância na direção do vento.

O valor de Π para que a dispersão no caso estudado seja considerada nuvem deve ser no máximo 0.6. Logo, para as condições de $u=2,2\text{m/s}$ e $R_d=3\text{h}$, o valor mínimo da distância atingida na direção do vento seria de 40 km. Sabe-se, entretanto, que a nuvem ou pluma não atingiu distâncias tão grandes. As pessoas afetadas pela dispersão, segundo o relatório, encontravam-se a uma distância menor que uma milha (cerca de 1,6 km). Mesmo sabendo que a dispersão pode ser considerada como uma pluma, simulou-se a dispersão também como nuvem, com o objetivo de comparação entre os dois tipos de dispersão.

6.1 – Simulação da liberação do cloro gasoso

Sabe-se que 80 mil lbm de cloro (cerca de 36 mil kg) se encontravam na forma líquida pressurizado dentro do tanque de armazenamento no momento do acidente. E ao ser liberado, passou para a fase vapor.

Utilizando a equação 2.18, programada com o auxílio do *software* Matlab® 7.6.0 (2008), podemos calcular quanto desta massa inicial de cloro seria vaporizada, e comparar com o dado do relatório investigativo de 48 mil lbm de cloro (cerca de 22 mil kg).



```
08a)
rallel Desktop Window Help
Current Directory: C:\Users\User\Desktop\Projeto Final 2011\programacao_quinta
Add What's New
Command Window
1 = Vazamento de gas atraves de um furo
2 = Vazamento adiabatico de gas atraves de tubos
3 = Vazamento isotermico de gas atraves de tubos
4 = Vazamento tipo Flash
Escolha seu caso: 4

Digite todas as entradas nas unidades pedidas.
Temperatura do liquido pressurizado, T0 (K): 21+273
Temperatura de ebulição da substancia à pressão menor, Tb (K): -34+273
Capacidade calorifica média da substancia liquido (J/(kg*K)): 1*10^3
Entalpia de vaporização média da substancia no intervalo [T0,Tb] (J/kg): 2.8*10^5
massa inicial da substancia dentro do container (kg): 36300
Massa de liquido vaporizada: 6.473741e+003 kg
```

Figura 12 - Visualização da programação do Modelo Fonte liberação tipo flash com dados do relatório investigativo.

Como podemos visualizar na figura 12, a resposta do programa para a massa de cloro vaporizada é de cerca de 6 mil kg, o que não condiz com a realidade de 22 mil Kg. Essa diferença se deve, possivelmente, a hipóteses para se chegar na equação 2.18.

Além disto, esta vaporização do cloro líquido apresenta perigos relacionados ao resfriamento do ambiente próximo ao vazamento podendo vir a causar queimaduras provocadas pelo frio, o que segundo o relatório ocorreu com 3 funcionários da fábrica no momento de limpeza do local. O calor envolvido no processo é tal que condensaria grande quantidade de água, conforme os cálculos mostrados nas equações. Para tais calculos 2 situações associadas a essa liberação são consideradas:

Tabela 9 – Dados utilizados para os cálculos de calor envolvido na vaporização do Cl₂

| | |
|--------------------------------------|---|
| Situação 1: Líquido dentro do tanque | Situação 1: Vapor logo após a vaporização |
| T1 = 21°C = 294K (consideração) | T1 = T2 (considerando isotérmico) |
| P1 = 100,15 psia | P2 = 14,7 psia |
| H1 = 125.32 BTU/lbm | H2 = 237.63 BTU/lbm |

Admitindo Cl₂ saturado dentro do tanque, os dados de entalpia, Hs, foram obtidos das tabelas em OxyChem Chlorine Handbook, Occidental Chemical Corporation, 2006.

$$\Delta H := H2 - H1 = 112.31 \cdot \frac{\text{BTU}}{\text{lb}} \quad (6.2)$$

Calculo de Q:

$$Q := m \cdot \Delta H = 5.688 \times 10^9 \text{ J} \quad (6.3)$$

Sendo m = 48000 lbm

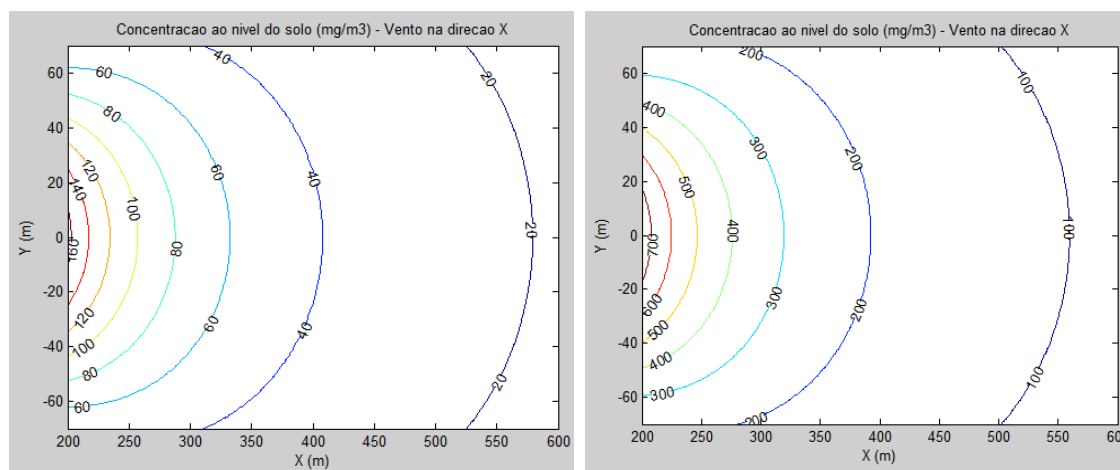
Cálculo da quantidade de água condensada. Sendo L, calor latente de condensação da água igual a 540 cal/g.

$$m_{\text{agua}} := \frac{Q}{L} = 2.516 \times 10^3 \text{ kg} \quad (6.4)$$

Apesar de em uma situação real acontecerem perdas para o ambiente, e que não há essa grande quantidade de água no ar ambiente para ser condensada. Essa condensação poderia causar entopimentos de tubos próximos a liberação de cloro, se houver água dentro destes esta pode congelar e causar a formação de blocos de gelo que entopem o tubo. Outro perigo a ser considerado é que esse frio pode causar queimaduras, como foi o caso citado no relatório investigativo, onde 3 das pessoas que estavam tentando parar o vazamento de gás cloro sofreram pequenas queimaduras cusadas pelo frio. Estas estavam protegidas contra o gás, mas não contra o frio.

6.2 – Simulação da dispersão do tipo pluma

Nas Figuras 13(a) e 13(b) são apresentados alguns resultados para a simulação da dispersão no acidente descrito no Capítulo 4, considerando a velocidade do vento igual a **2,2m/s**.



(a)

(b)

Figura 13 - (a) Isopleta resultante do modelo de Pasquill & Gifford (b) Isopleta resultante do modelo de Bureau of Mines - – velocidade do vento igual a 2,2 m/s

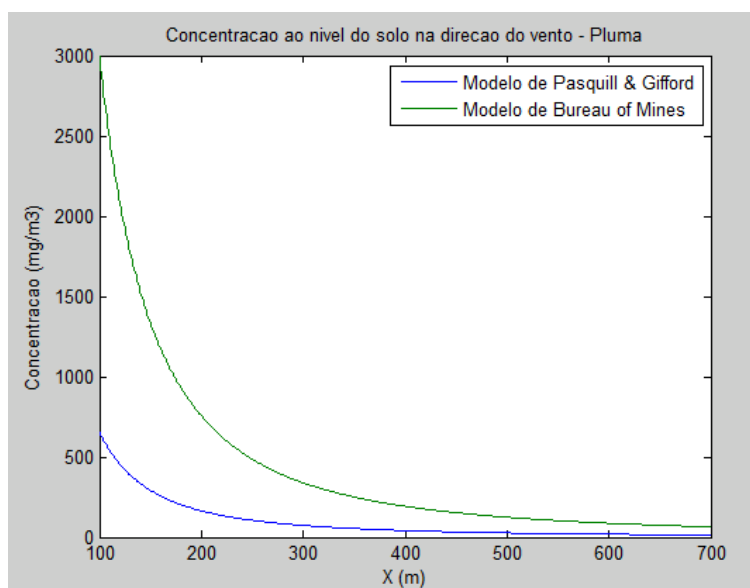


Figura 14 - Gráfico comparativo Concentração de Cl₂ ao nível do solo vs distância na direção do vento, x – Modelo de Pasquill & Gifford e Bureau of Mines – Pluma – velocidade do vento igual a 2,2 m/s

É possível concluir, com a comparação das isopletras e do gráfico da concentração versus distância na direção do vento (Figuras 13 e 14), que, para uma mesma distância na direção do vento, a concentração de Cl₂ calculada pelo modelo do *Bureau of Mines* é maior do que a calculada pelo modelo de Pasquill-Gifford. Este último considera que, ao ser liberado, o gás será dissipado mais rapidamente pelo ar na atmosfera, resultando em menores concentrações do gás próximas à fonte da liberação. Mas o Cl₂ é um gás denso, cuja densidade é duas vezes e meia a densidade do ar (que é 1,22 kg/m³). Por isso, espera-se que o modelo que mais se aproxime da realidade seja o de *Bureau of Mines*, que apenas modificando o σ_z inclui a influência da gravidade na dispersão de um gás denso.

No gráfico comparativo da figura 15, que inclui o modelo de Britter & McQuaid, podemos observar que este último apresenta resultados para concentrações

superiores aos dos modelos de Pasquill-Gifford e *Bureau of Mines*, para uma mesma distância.

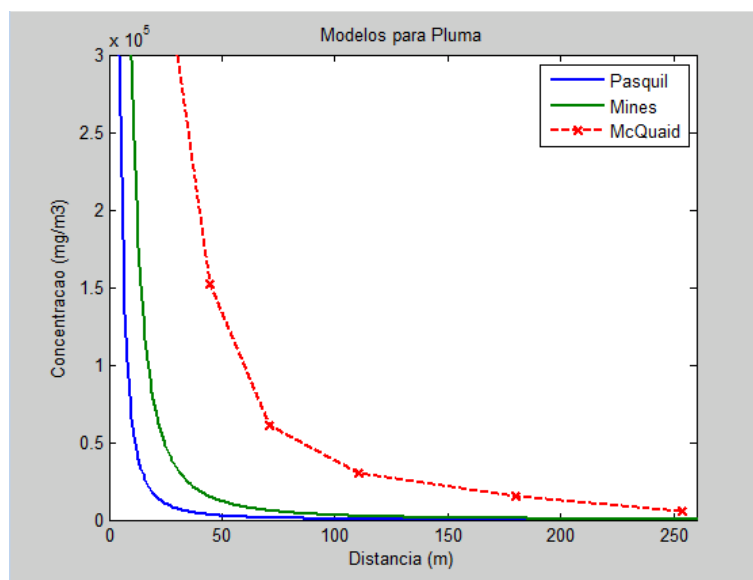


Figura 15 -Gráfico comparativo Concentração de Cl_2 ao nível do solo vs distância na direção do vento, x – Modelo de Pasquill & Gifford, Bureau of Mines e Britter & McQuaid – Pluma – velocidade do vento igual a 2,2 m/s

Já a simulação com o modelo de van Ulden, mostrada na Figura 16, fornece a geometria da pluma e a distância em que há a transição gravitacional/turbulenta para o caso da velocidade do vento igual a 2,2 m/s. Nota-se que este modelo detecta que a distância de transição é muito pequena (cerca de 5 cm). Assim, pode-se concluir que, durante a maior parte da distância na direção do vento, os efeitos de turbulência da atmosfera predominam ao longo da pluma, e por isto os modelos de Pasquill-Gifford e *Bureau of Mines* não seriam aproximações ruins da realidade. Nota-se, ainda, que qualitativamente a pluma prevista pelo modelo de van Ulden corresponde à pluma esperada para um gás denso: a altura da pluma diminui com a distância, enquanto sua largura aumenta, isso ocorre até a distância de transição. Após essa distância há dispersão gaussiana em todas as direções, o que causa aumento da altura da pluma.

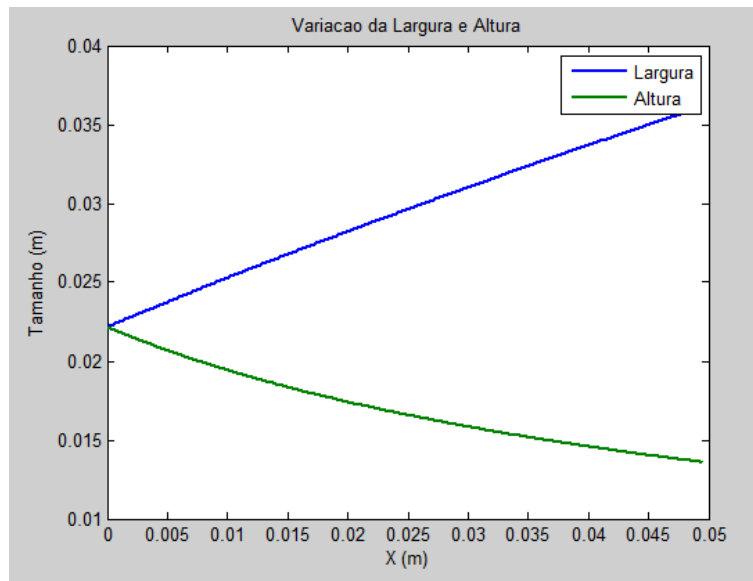
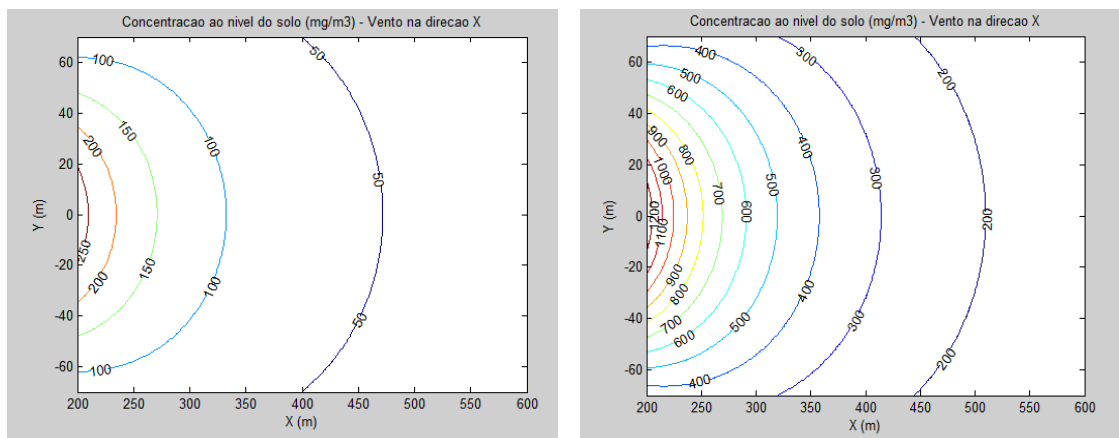


Figura 16 - Variação de largura e altura nos primeiros instantes da dispersão do Cl_2 vs distância na direção do vento segundo Modelo de van Ulden - Pluma

A seguir, são apresentados resultados para a simulação da dispersão de cloro neste acidente, considerando a velocidade do vento igual a **1,3m/s**. Na figura 17 estão representadas as isopletas, na figura 18, o gráfico comparativo dos modelos de dispersão de Pasquill-Gifford e Bureau of Mines. Além disso, a figura 19 apresenta a comparação dos dois modelos citados anteriormente e o de Britter-McQuaid.



(a)

(b)

Figura 17 -(a) Isopleta resultante do modelo de Pasquill & Gifford (b) Isopleta resultante do modelo de Bureau of Mines – velocidade do vento igual a 1,3 m/s

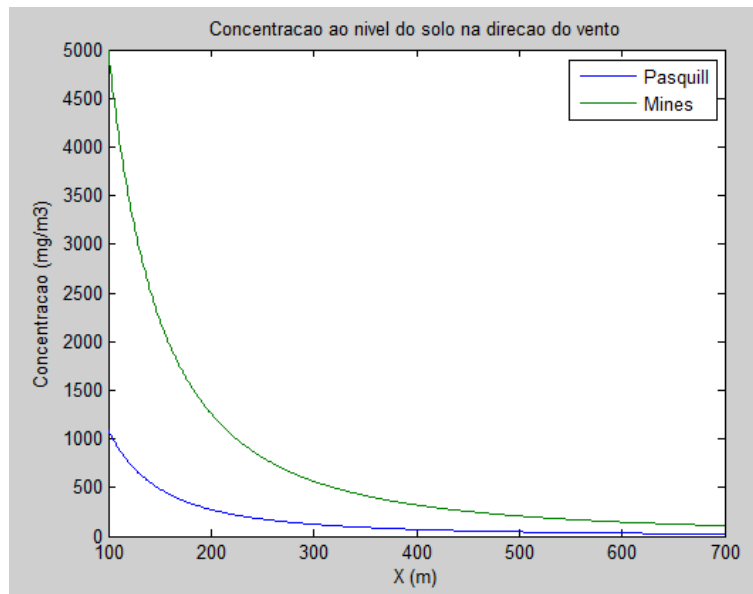


Figura 18 - Gráfico comparativo Concentração de Cl₂ ao nível do solo vs distância na direção do vento, x – Modelo de Pasquill & Gifford e Bureau of Mines – Pluma – velocidade do vento igual a 1,3 m/s

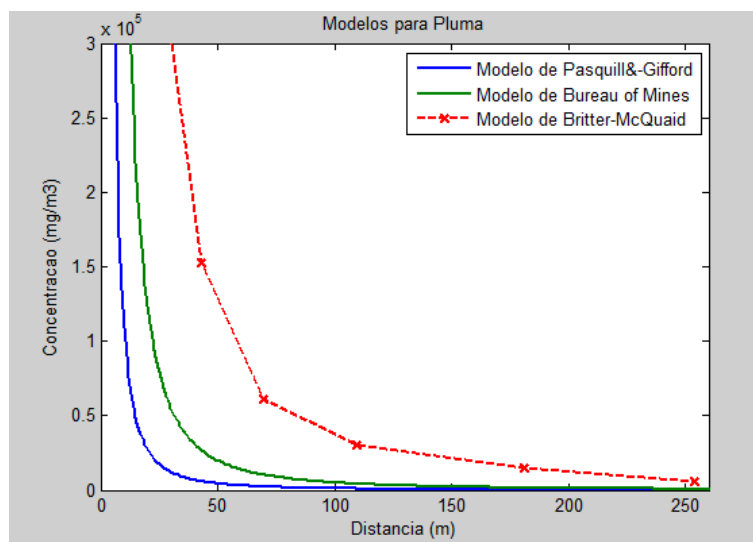


Figura 19 -Gráfico comparativo Concentração de Cl₂ ao nível do solo vs distância na direção do vento, x – Modelo de Pasquill & Gifford, Bureau of Mines e Britter & McQuaid – Pluma – velocidade do vento igual a 1,3 m/s

Com o modelo de Britter-McQuaid, na Figura 19, são previstas concentrações mais elevadas. Assim, em uma análise mais conservadora, o pior caso seria aquele predito por este modelo, e deveria ser levado em conta para análise dos riscos desta unidades. Por último, na figura 20, o gráfico resposta do Modleo de van Ulden é também apresentado para a velocidade de 1,3 m/s.

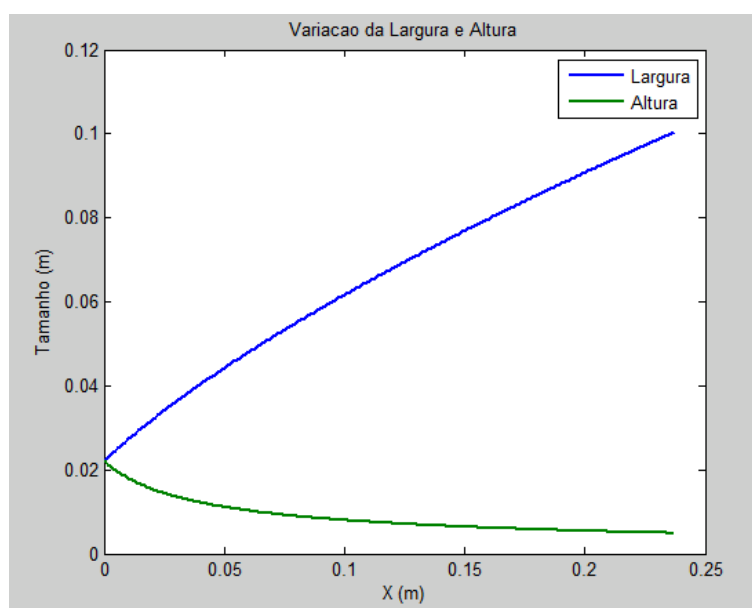


Figura 20 - Variação de largura e altura nos primeiros instantes da dispersão do Cl_2 vs distância na direção do vento segundo Modelo de van Ulden – Pluma – velocidade do vento igual a 1,3 m/s

Embora as figuras 15 e 19 pareçam as mesmas, estas apresentam uma pequena diferença entre si, em relação aos resultados dos modelos de Pasquill-Gifford e *Bureau of Mines*. Quando a velocidade do vento diminui, espera-se que a concentração do material aumente para uma mesma distância, pois os efeitos de diluição por turbulência serão menores, o que é confirmado nos resultados mostrados na Figura 21 a seguir.

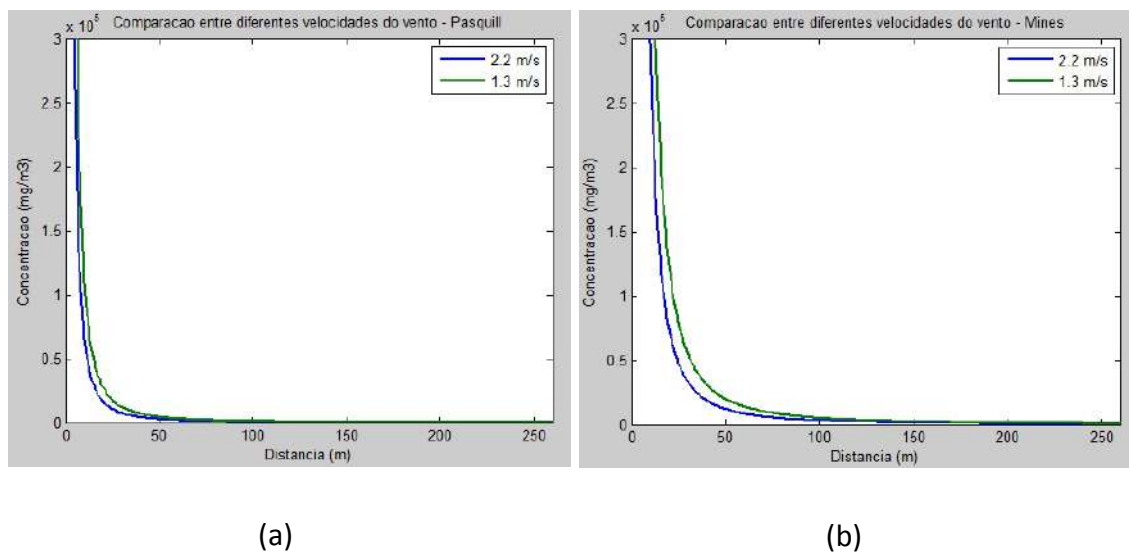


Figura 21 - Comparação dos resultados entre diferentes velocidades (a) Modelo de Pasquill&Gifford e (b) Modelo de Bureau of Mines

Nota-se, na Figura 20, a altura e a largura da pluma previstas para o modelo de van Ulden, antes de haver a transição para o regime predominantemente turbulento. Neste caso, em que a velocidade do vento é 1,3 m/s, a distância de transição foi de cerca de 25 cm, maior que no caso de velocidade do vento igual a 2,2 m/s. Este aumento na distância de transição é esperado, pois, com a diminuição da velocidade, a transição para dispersão turbulenta acontece mais longe da fonte. Isto também significa que após 25 cm os modelos de dispersão de empuxo neutro seriam aproximações razoáveis para a dispersão do gás na maior parte da trajetória do gás.

O modelo de van Ulden também foi utilizado para verificar a distância de transição em um caso em que a velocidade do vento é de 0,05 m/s, conforme a Figura 22.

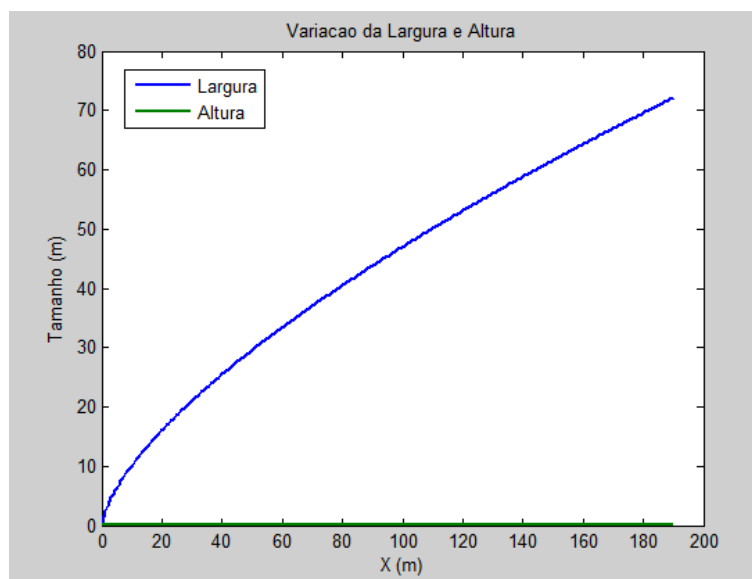


Figura 22 - Variação de largura e altura nos primeiros instantes da dispersão do Cl_2 vs distância na direção do vento segundo Modelo de van Ulden – Pluma – velocidade do vento igual a 0,05 m/s

Como o relatório investigativo não fornece dados de concentração de Cl_2 medida a uma determinada distância, exceto as medidas próximas à (que superavam 1000ppm), não se pode confirmar o melhor modelo diretamente. Também segundo o relatório investigativo, a exposição de uma pessoa a 10ppm de Cl_2 (cerca de $29mg/m^3$) causaria irritação respiratória moderada, a 430ppm ($1247 mg/m^3$) causaria a morte em cerca de 30 minutos e a 1000ppm causaria a morte em poucos minutos. Como, segundo o relatório, 63 pessoas procuraram o hospital local reclamando sobre dificuldades de respiração, pode-se inferir que elas tenham sido expostas a uma concentração de pelo menos 10ppm.

Ainda segundo o relatório, as regiões mais próximas do local do vazamento são a área para *trailers Blue Fountain*, localizada do lado oeste da empresa (e que possivelmente foi afetada em momentos de velocidade do vento nula), e as empresas *Goodwin Brothers Construction* e *Intermodal Tire Services*, que se encontram aproximadamente a uma distância de 100 m. Possivelmente, as pessoas que sofreram este tipo de desconforto entraram em contato com o cloro durante

sua evacuação, que aconteceu rapidamente, nos primeiros minutos do vazamento (Investigation Report - Chlorine Release, 2003).

6.3 – Simulação da dispersão do tipo

Se a dispersão tivesse sido do tipo nuvem, as consequências teriam sido muito piores, como podemos concluir avaliando os gráficos a seguir. Estes modelam o acidente como sendo de dispersão do tipo nuvem, ou seja, quase instantânea.

No primeiro grupo de resultados apresentado, considera-se a velocidade do vento igual a 2,2 m/s.

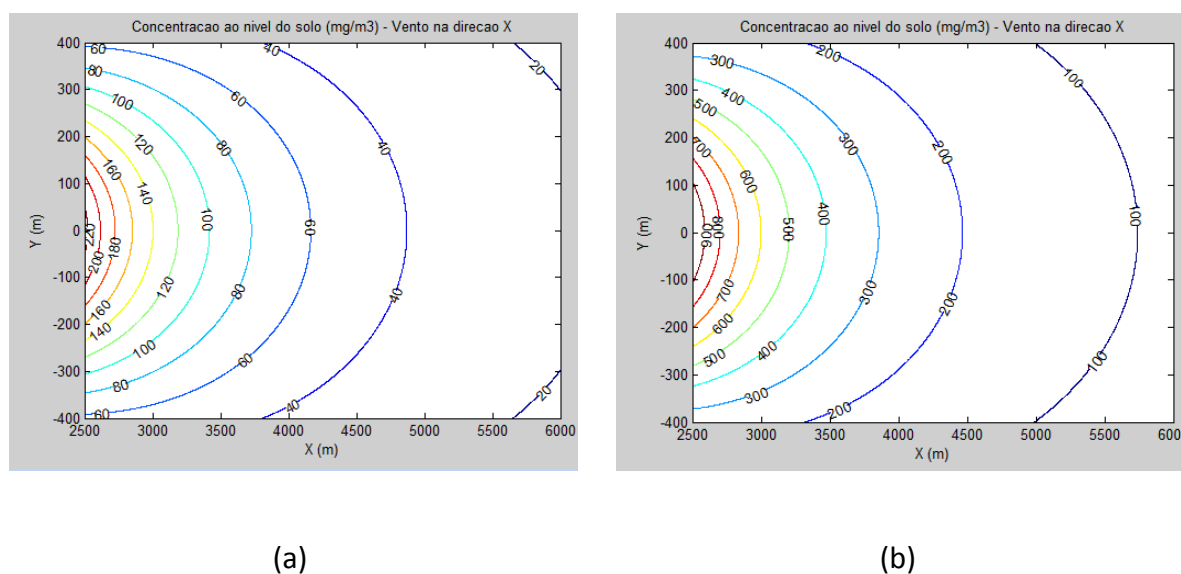
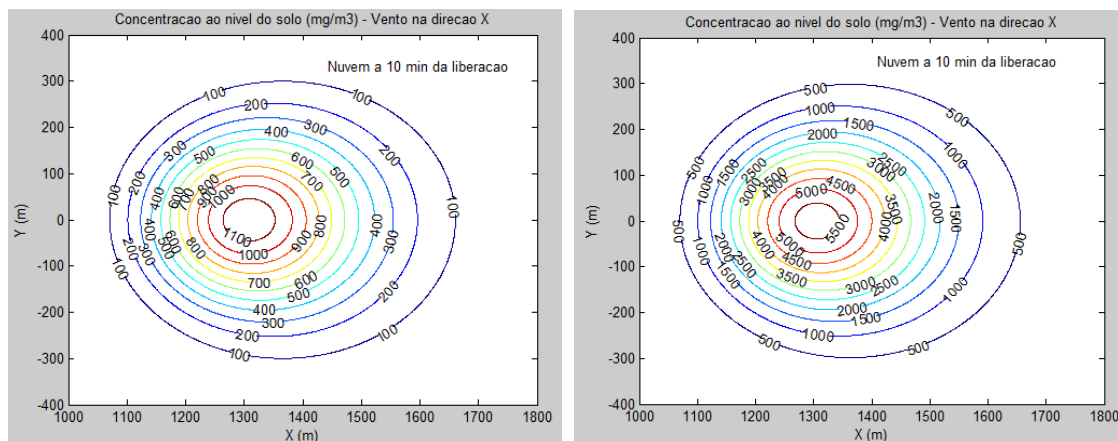


Figura 23 - (a) Isopleta resultante do modelo de Pasquill & Gifford (b) Isopleta resultante do modelo de Bureau of Mines – velocidade do vento igual a 2,2 m/s.

Outras isopletas, além das apresentadas na figura 23, podem ser geradas se o objetivo é a obtenção da concentração de Cl_2 nos eixos x e y a um tempo determinado. No caso das isopletas da figura 24, o tempo usado para gerá-las foi de 10 min.

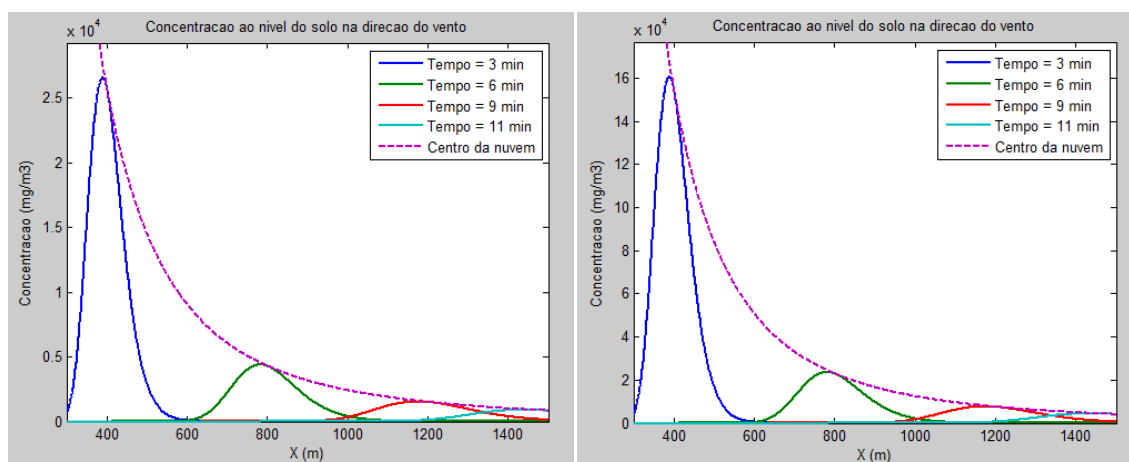


(a)

(b)

Figura 24 - (a) Isopleta resultante do modelo de Pasquill & Gifford (b) Isopleta resultante do modelo de Bureau of Mines – velocidade do vento igual a 2,2 m/s no tempo de 10 min

Também podemos plotar os gráficos para dispersão da nuvem, modelos de Pasquill-Gifford e *Bureau of Mines*. Estes gráficos representam a nuvem em diferentes tempos. Para cada valor de tempo podemos calcular a concentração de Cl_2 no centro da nuvem (concentração máxima) e distância da fonte na direção do vento.



(a)

(b)

Figura 25 - Gráficos a diferentes tempos de Concentração de Cl_2 ao nível do solo vs distância na direção do vento, x - Modelo de Pasquill & Gifford e Bureau of Mines - Nuvem - velocidade do vento igual a 2,2 m/s.

Novamente, se prevêem concentrações maiores ao nível do solo com o modelo do *Bureau of Mines*. Podemos concluir com a comparação dos resultados para uma pluma e uma nuvem, que com a dispersão tipo nuvem altas concentrações de Cl_2 são atingidas em grandes distâncias, o que causaria às pessoas expostas sérios problemas de saúde ou risco de vida, dependendo da concentração do material (olhar tabela 7). A Figura 26 mostra a comparação entre os três modelos para dispersão do tipo nuvem.

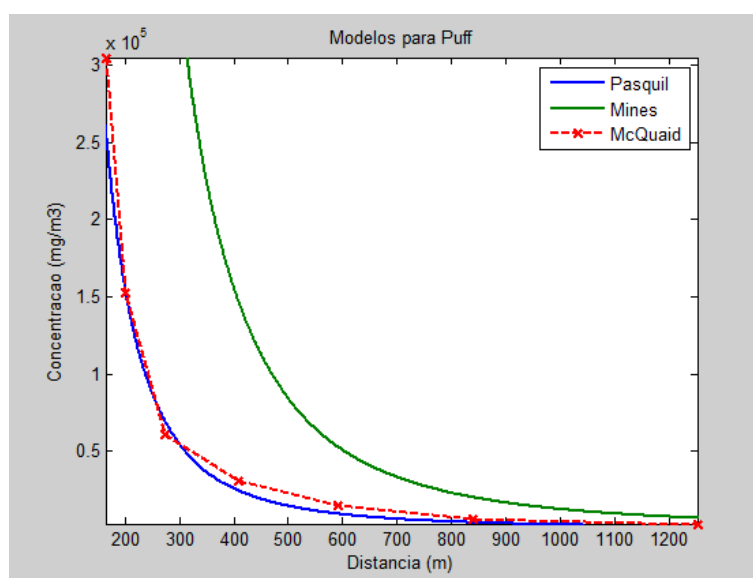
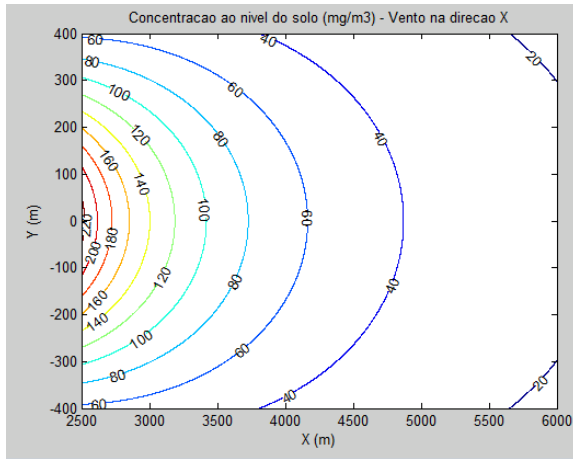


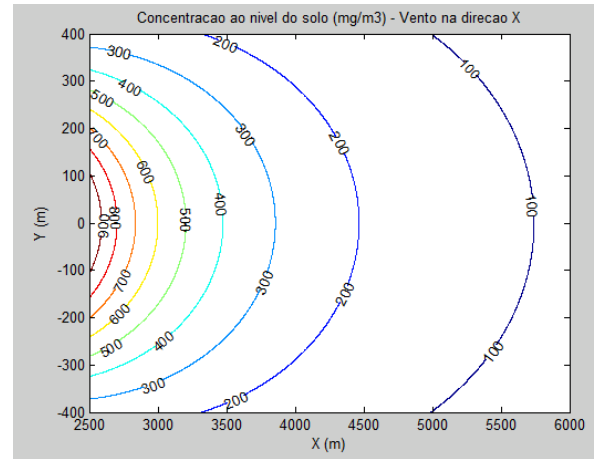
Figura 26 - Gráfico comparativo Concentração de Cl_2 ao nível do solo vs distância na direção do vento, x – Modelo de Pasquill & Gifford, Bureau of Mines e Britter & McQuaid – Pluma – velocidade do vento igual a 2,2 m/s

Nota-se que, neste caso, o modelo de Britter-McQuaid apresentou resultados semelhantes aos do modelo de Pasquill-Gifford. Possivelmente, o modelo do *Bureau of Mines* previu um gás que aparenta ser mais denso do que é na realidade, numa situação em que a diluição do gás é rápida (a velocidade do vento é considerável).

Os resultados para a velocidade de **1,3m/s** encontram-se nas figuras 27 e 28.



(a)



(b)

Figura27 - (a) Isopleta resultante do modelo de Pasquill & Gifford (b) Isopleta resultante do modelo de Bureau of Mines – velocidade do vento igual a 1,3 m/s.

Nestas condições de velocidade o modelo de Britter & McQuaid para dispersão em forma de nuvem não é válido, resultando em um alfa (olhar tabela 5) maior que 1. Por isso, o único gráfico comparativo gerado é o que se encontra na figura 28.

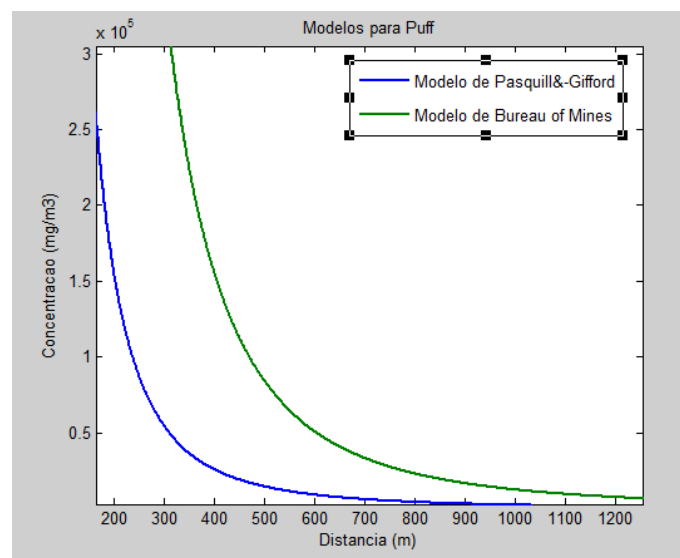


Figura 28 -Gráfico comparativo Concentração de Cl₂ ao nível do solo vs distância na direção do vento, x – Modelo de Pasquill & Gifford, Bureau of Mines - Nuvem -velocidade do vento igual a 1,3 m/s

Podemos observar que, nas duas velocidades comparadas (2,2 m/s e 1,3 m/s), não se alteram os resultados de concentração para o caso de dispersão do tipo nuvem. Isso se deve ao fato de que as equações que descrevem este tipo de dispersão, no caso de $y = z = 0$, não dependem da velocidade do vento diretamente.

A seguir, são mostradas tabelas com resultados da distância em metros na velocidade do vento em que são atingidas quatro concentrações diferentes: 10 ppm, 30 ppm, 60 ppm e 430 ppm, que são as concentrações limitantes para o surgimento de irritação do trato respiratório, dores no peito, edema pulmonar e morte em 30 minutos de exposição, respectivamente (Investigation Report - Chlorine Release, 2003). Estes resultados sintetizam aqueles apresentados nas figuras deste capítulo.

Tabela 10 – Resultados de distâncias (m) na velocidade do vento a uma determinada concentração de Cl_2 – velocidade 2,2 m/s

| 2,2 m/s | | | | |
|----------|-----------------------------|-----------------------------|------------------------------|--------------------------------|
| | 29mg/m ³ (10ppm) | 87mg/m ³ (30ppm) | 174mg/m ³ (60ppm) | 1247mg/m ³ (430ppm) |
| NUVEM | | | | |
| Pasquill | 5515 | 3608 | 2761 | 1291 |
| Bureau | 8990 | 6038 | 4697 | 2301 |
| PLUMA | | | | |
| Pasquill | 480 | 276 | 195 | 72 |
| Bureau | 1064 | 601 | 421 | 155 |

Tabela 11 - Resultados de distâncias (m) na velocidade do vento a uma determinada concentração de Cl₂ – velocidade 1,3 m/s

| 1,3 m/s | | | | |
|----------|-----------------------------|-----------------------------|------------------------------|--------------------------------|
| | 29mg/m ³ (10ppm) | 87mg/m ³ (30ppm) | 174mg/m ³ (60ppm) | 1247mg/m ³ (430ppm) |
| NUVEM | | | | |
| Pasquill | 5515 | 3608 | 2761 | 1291 |
| Bureau | 8990 | 6038 | 4697 | 2301 |
| PLUMA | | | | |
| Pasquill | 662 | 357 | 252 | 94 |
| Bureau | 1394 | 783 | 547 | 201 |

Tabela 12- Resultados de distâncias (m) na velocidade do vento a uma determinada concentração de Cl₂ – velocidade 0,05 m/s

| 0,05 m/s | | | | |
|----------|-----------------------------|-----------------------------|------------------------------|--------------------------------|
| | 29mg/m ³ (10ppm) | 87mg/m ³ (30ppm) | 174mg/m ³ (60ppm) | 1247mg/m ³ (430ppm) |
| NUVEM | | | | |
| Pasquill | 5515 | 3608 | 2761 | 1291 |
| Bureau | 8990 | 6038 | 4697 | 2301 |
| PLUMA | | | | |
| Pasquill | 3413 | 1913 | 1336 | 489 |
| Bureau | 9423 | 4739 | 3167 | 1086 |

Novamente, observamos que para dispersão do tipo nuvem essa diferença de velocidade não influencia na concentração do material a uma determinada distância, pois os três casos (3 velocidades diferentes) representam a mesma classe de estabilidade A (extremamente instável).

No entanto, os modelos de dispersão tipo pluma de Pasquill-Gifford e *Bureau of Mines* dependem diretamente da velocidade como mostrada na equação (3.7). Logo, como se esperava, para velocidades menores, teremos maiores concentrações de Cl₂ na mesma distância.

O modelo de Britter-McQuaid não foi incluído nas Tabelas 10, 11 e 12 porque este limita-se a altas concentrações de Cl₂, sendo a mínima concentração analisável por este modelo igual a 6000 mg/m³ (pluma) e 3000 mg/m³ (nuvem).

Acredita-se que as pessoas que apresentaram problemas respiratórios ficaram expostas por um curto tempo a concentrações altas, bem maiores que 10 ppm, e talvez até 430 ppm (que segundo o relatório exposição a esta concentração causaria morte após 30 min). Como podemos observar nas Tabelas 10, 11 e 12, a concentração de 60 ppm, que é aquela em que começa a haver sintomas de edema pulmonar, seria detectada nas distâncias explicitadas na Tabela 13.

Tabela 13 - Valores de distância (m) para diferentes modelos para a concentração de 60 ppm

| | |
|---------------------|--------|
| Pasquill – 2,2 m/s | 195 m |
| Bureau – 2,2 m/s | 421 m |
| Pasquill – 1,3 m/s | 252 m |
| Bureau – 1,3 m/s | 547 m |
| Pasquill – 0,05 m/s | 1336 m |
| Bureau – 0,05 m/s | 3167 m |

Segundo os dados da Tabela 13 os funcionários das empresas a leste da DCP Festus, localizadas a cerca de 100 metros de distância, teriam ficado expostos a concentrações de Cl₂ ainda maiores do que 60 ppm no momento de evacuação, mesmo para velocidades maiores. Isto justifica a ocorrência de 63 hospitalizações naquele dia.

Os dados de todas as tabelas também sugerem que os resultados da programação no Matlab® são, ao menos, qualitativamente razoáveis. Entretanto, as simulações mostram que concentrações de cloro perigosas, como 430 ppm, poderiam estar presentes em locais próximos à unidade da DPC Festus (por exemplo, conforme a Tabela 100), e poderiam ter causado mortes entre as pessoas que ali estavam no momento do acidente. Felizmente, o procedimento de evacuação foi eficiente e não houve mortes; além disso, naquele dia, ventava somente em direção às empresas *Goodwin Brothers Construction* e *Intermodal Tire Services*. Se ventasse em direção ao estacionamento de trailers *Blue Fountain*, que é bastante próximo da unidade da DPC, as conseqüências poderiam ter sido muito piores.

Capítulo 7 - Conclusões

No presente trabalho, apresentou-se a comparação de diversos modelos para a simulação de um acidente envolvendo a dispersão de cloro gasoso, ocorrido na unidade de envasamento DPC Enterprises (EUA), utilizando os modelos de liberação e dispersão encontrados em CROWL e LOUVAR (2002) e LEES (1995).

Com os resultados apresentados no capítulo 6, confirmou-se que a hipótese de dispersão do tipo pluma é razoável e que o caso estudado não era dispersão tipo nuvem. Além disso, é possível analisar a influência da velocidade para os diferentes tipos de dispersão (pluma e nuvem). Enquanto na modelagem da dispersão tipo pluma a concentração de Cl_2 no centro da pluma, para uma mesma distância x na direção do vento, aumenta com a diminuição da velocidade do vento.

Como demonstrado, no caso em estudo, para as velocidades de vento adotadas para a modelagem do acidente, os resultados das dispersões tipo nuvem não sofreram alteração em relação a diferentes velocidades, diferente das dispersões tipo pluma que ao se diminuir a velocidade observa-se o aumento da concentração de Cl_2 para uma mesma distância na direção do vento.

Verificou-se ainda, que o modelo de Britter-McQuaid é aplicável apenas a altas concentrações de Cl_2 , sendo a mínima concentração analisável por este modelo igual a 6000 mg/m^3 (pluma) e 3000 mg/m^3 (nuvem). O que corresponde a 0.002 e 0.001 vezes a concentração do produto na fonte de vazamento, respectivamente. Fonte retirada das tabelas 4 e 5.

Com o modelo de van Ulden, mostrou-se que, para as velocidades de vento consideradas no caso em questão, os modelos de dispersão gaussianos, como o de Pasquill-Gifford, representam razoavelmente a dispersão da pluma de cloro. Entretanto, para velocidades de vento baixas, o modelo de van Ulden aponta que tais modelos não são válidos próximos à fonte da liberação, pois em distâncias menores o efeito gravitacional sobre a dispersão do gás denso ainda é importante.

Após a análise dos resultados, é possível concluir que os modelos de dispersão representam, pelo menos de forma qualitativa, a dispersão do cloro neste acidente. Entretanto, a falta de informações precisas sobre detalhes do acidente e sobre as concentrações de Cl_2 atingidas em determinadas distâncias dificultam a comparação da simulação a dados reais. Salienta-se, contudo, que tais dados são escassos para a maioria dos acidentes.

Os resultados das simulações mostram que os trabalhadores e residentes em áreas próximas à do acidente podem ter sido expostos a concentrações altas de cloro. As simulações mostram que, na direção do vento, podem ter sido atingidas concentrações maiores do que 60 ppm na região das empresas *Goodwin Brothers Construction* e *Intermodal Tire Services*, o que justificaria a hospitalização de 63 pessoas por causa da liberação de cloro.

Capítulo 8 - Referência Bibliográfica

CROWL, D. A.; LOUVAR, J. F.. *Chemical Process Safety – Fundamentals with Applications*. 2ª Edição, Prentice Hall PTR, Estados Unidos, 2002.

ELLENHORN, M. J.; BARCELOUX D.G.. *Medical Toxicology: Diagnosis and Treatment of Human Poisoning*, Elsevier Science Publishing Co., Inc., 1988.

KLETZ, T.. *Learning from Accidents*. 3ª Edição, Gulf Professional Publishing, Inglaterra, 2001.

LEES, F. P.. *Loss Prevention in the Process Industries – Hazard Identification, Assessment and Control*. 2ª Edição, Volume 2, Butterworth Heinemann, Inglaterra, 1996.

MATHWORKS. Matlab 6.1. 2001. Disponível em: <http://www.mathworks.com/>. Acesso em: 19 maio 2011.

___ , *Investigation Report - Chlorine Release - DPC Enterprises, L. P., Report No. 2002 - 04-I-MO*, U.S. Chemical Safety and Hazard Investigation Board, Washington, D. C. 2003.

___ , *OxyChem Chlorine Handbook*. Occidental Chemical Corporation. Disponível em: www.oxy.com . Acesso em 27 maio 2011.

DROGARIS, G. *Major accidents reporting system: lessons learned from accidents notified*. London, Elsevier, 1993.

PIERRE R.. *Handbook of Corrosion Engineering*, McGraw Hill, Roberge, Pierre R., 2000

___ , *NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards, "Chlorine,"* . National Institute of Occupational Safety and Health (NIOSH), 2003. Disponível em: www.cdc.gov/niosh/npg/npgd0115.html

Apêndice A

A validação da programação dos modelos fonte foi realizada utilizando-se o exemplo resolvido 4.5 do livro Crowl (páginas 147-150).

Modelo Fonte

Nome do arquivo: fonte

```
% Programacao dos Modelos Fonte para gás do livro Crowl & Louvar -
Objetivando a quantificacao da substancia vazada

clear all
clc

global P1 P2 gc g L d rug K1 Kinf T1 gamma M Ktotal T0 Tb cp m
DeltaHv

disp('1 = Vazamento de gas atraves de um orificio')
disp('2 = Vazamento adiabatico de gas atraves de tubos')
disp('3 = Vazamento isotermico de gas atraves de tubos')
disp('4 = Vazamento tipo Flash')
caso=input('Escolha seu caso: ');
while isscalar(caso)==0 || ismember(caso,1:4)==0
    disp('Escolha invalida.')
    caso=input('Escolha novamente seu caso: ');
end
disp(' ')
gc=1; % Constante gravitacional
g=10; % Aceleracao da gravidade

switch caso
    % Vazamento de gas atraves de um furo, consideranco expansao de
    % gas livre, porque este requer apenas o diametro
    % do vazamento entre todas as informacoes da estrutura fisica do
    % vazamento
    case 1
        disp('Digite todas as entradas nas unidades pedidas. ');
        P=input('Pressao manometrica fora do sistema (atm): ');
        P=(P+1)*101300; %Pa
        P0=input('Pressao manometrica dentro do sistema (atm):
        ');P0=(P0+1)*101300; %Pa
        T0=input('Temperatura dentro do sistema (K): ');
        v0=0; % Velocidade dentro do sistema eh desprezivel, hipotese
do modelo
        Rg=8.31; % Constante dos gases J/mol*K
        gamma=input('Razao das capacidades calorificas; gamma: '); %
cp/cv, considerando a expansao isentropica de um gas ideal
        M=input('Massa molar (g/mol): '); M=M/1000; %kg/mol
        d=input('Diametro do orificio (mm): '); d=d/1000; % m
        A=pi*(d^2)/4; % Area do orificio
```

```

C0=input('Coeficiente de Descarga (C0) = '); % Coeficiente de
Descarga
Pcho=P0*(2/(gamma+1))^(gamma/(gamma-1)); % Equacao 4.49,
pagina 132 - Calcula a pressao apartir do qual o sistema vira choked
disp(' ')
if P<=Pcho
    disp('Choked flow esperado.')

Qmcho=C0*A*P0*((gamma*gc*M/(Rg*T0))*(2/(gamma+1))^((gamma+1)/(gamma-
1)))^0.5; % equacao 4.50 pagina 133
    disp(sprintf('Vazao massica: %d kg/s',Qmcho))
else
    vel=((2*gc*(C0^2)*Rg*T0/M)*(gamma/(gamma-1))*(1-
(P/P0)^((gamma-1)/gamma)))^0.5; % equacao 4.45 pagina 132
    ro0=P0*M/(Rg*T0); % equacao do gases ideais
    ro=ro0*(P/P0)^(1/gamma); % equacao 4.47, pagina 132
    Qm=vel*A*ro; %kg/s % equacao 4.46, pagina 132
    disp(sprintf('Vazao massica: %d kg/s',Qm))
end

% Vazamento adiabatico de gas atraves de tubos
case 2
    disp('Digite todas as entradas nas unidades pedidas. ');
    T1=input('Temperatura de upstream (K): ');
    P1=input('Pressao manometrica de upstream (atm): ');
    P1=(P1+1)*101300; %Pa
    P2=input('Pressao manometrica de downstream (atm): ');
    P2=(P2+1)*101300; %Pa
    gamma=input('Razao das capacidades calorificas GAMMA: ');
    M=input('Massa molar (g/mol): '); M=M/1000; %kg/mol
    Rg=8.31; % Constante dos gases J/mol*K
    rug=input('Rugosidade da tubulacao (mm): '); rug=rug/1000; %m
    d=input('Diametro da tubulacao (mm): '); d=d/1000; %m
    L=input('Comprimento da tubulacao (m): ');
    METODO2K % Abre o programa que ajuda a escolher os fittings
da tubulacao
    K1=sum(escolha(:,1));
    Kinf=sum(escolha(:,2));
    options=optimset('Display','off');
    x0=0.5;
    [Ma1,desvio1]=fsolve(@Mach_adi,x0,options);
    Ma1=abs(Ma1);
    Y1=1+((gamma-1)/2)*Ma1^2;
    Pcho=P1*Ma1*(2*Y1/(gamma+1))^0.5;
    disp(' ')
    if P2<=Pcho
        disp('Choked flow esperado.')
        Gcho=Ma1*P1*((gamma*gc*M)/(Rg*T1))^0.5;
        Qm=Gcho*pi*(d^2)/4;
        disp(sprintf('Vazao massica: %d kg/s',Qm))
    else
        x0=T1-10; % chute proximo a T interna do sistema
        [T2,desvio2]=fsolve(@gaspipes,x0,options); % para
encontrar T2 a partir das equacoes 4.61 e 4.62
        G=((2*gc*M/Rg)*(gamma/(gamma-1))*((T2-T1)/((T1/P1)^2-
(T2/P2)^2)))^0.5;
        Qm=G*pi*(d^2)/4;
        disp(sprintf('Vazao massica: %d kg/s',Qm))
    end

case 3

```

```

disp('Digite todas as entradas nas unidades pedidas. ');
T=input('Temperatura de upstream (K): ');
P1=input('Pressao manometrica de upstream (atm): ');
P1=(P1+1)*101300; %Pa
P2=input('Pressao manometrica de downstream (atm): ');
P2=(P2+1)*101300; %Pa
gamma=input('Razao das capacidades calorificas: ');
M=input('Massa molar (g/mol): '); M=M/1000; %kg/mol
Rg=8.31; % Constante dos gases J/mol*K
rug=input('Rugosidade da tubulacao (mm): '); rug=rug/1000; %m
d=input('Diametro da tubulacao (mm): '); d=d/1000; %m
L=input('Comprimento da tubulacao (m): ');
METODO2K % Abre o programa que ajuda a escolher os fittings
da tubulacao
K1=sum(escolha(:,1));
Kinf=sum(escolha(:,2));
options=optimset('Display','off');
x0=0.5;
[Mal,desvio1]=fsolve(@Mach_iso,x0,options);
Pcho=P1*Mal*gamma^0.5; % equacao 4.79, pagina 145
disp(' ')
if P2<=Pcho
    disp('Choked flow esperado.')
    Gcho=Pcho*((gc*M)/(Rg*T))^0.5; % Equacao 4.82, pagina 145
    Qm=Gcho*pi*(d^2)/4;
    disp(sprintf('Vazao massica: %d kg/s',Qm))
else
    G=((gc*M)/(Rg*T))*(P1^2-P2^2)/(Ktotal+2*log(P1/P2))^0.5;
% Equacao 4.75 rearrumada, pagina 145
    Qm=Gcho*pi*(d^2)/4;
    disp(sprintf('Vazao massica: %d kg/s',Qm))
end
% Vazamento tipo Flash, considerado adiabatico
case 4
    disp('Digite todas as entradas nas unidades pedidas. ')
    T0=input('Temperatura do líquido pressurizado, T0 (K): ');
    Tb=input('Temperatura de ebulição da substancia à pressão
menor, Tb (K): ');
    cp=input('Capacidade calorífica média da substancia
líquido(J/(kg*K)): ');
    DeltaHv=input('Entalpia de vaporização média da substancia no
intervalo [T0,Tb] (J/kg): ');
    m=input('massa inicial da substancia dentro do container
(kg): ');
    mv=m*(1-exp((-cp*(T0-Tb))/DeltaHv));
    disp(sprintf('Massa de liquido vaporizada: %d kg',mv))
end
% Programa validado com o exemplo resolvido 4.5 do livro Crowl,
pagina 147/150

```

Nome do arquivo: METODO2K

```

tabela1=[800,0.40;800,0.25;800,0.20;1000,1.15;800,0.35;800,0.30;800,0
.27;800,0.25;500,0.20;500,0.15;500,0.25;500,0.15;1000,0.60;1000,0.35;
1000,0.30]; % joelhos
tabela2=[500,0.70;800,0.40;800,0.80;1000,1.00;200,0.10;150,0.50;100,0
.00]; % T's

```



```
tabela3=[300,0.10;500,0.15;1000,0.20;1500,4.00;1000,2.00;1000,2.00;80
0,0.25;2000,10.0;1500,1.50;1000,0.50]; % Valvulas
% coluna1=K1 e coluna2=Kinfinito
```

```
escolha1=[]; escolha2=[]; escolha3=[]; escolha4=[]; escolha5=[]; %
abrindo variaveis pra depois
```

```
disp(' ')
disp('Obs: Metodo 2-K sendo utilizado')
joelhos=input('Essa parte da tubulacao apresenta quantos joelhos? ');
if joelhos~=0
disp('Identifique na tabela abaixo seu(s) joelho(s).')
disp('1 = 90° Standard (r/D=1), threaded')
disp('2 = Standard (r/D=1), flanged/welded')
disp('3 = Long Radius (r/D=1.5), all types')
disp('4 = Mitered (r/D=1.5): 1 weld (90°)')
disp('5 = 2 welds (45°)')
disp('6 = 3 welds (30°)')
disp('7 = 4 welds (22.5°)')
disp('8 = 5 welds (18°)')
disp('9 = 45° Standard (r/D=1), all types')
disp('10= Long Radius (r/D=1.5)')
disp('11= Mitered, 1 weld(45°)')
disp('12= Mitered, 2 welds(22.5°)')
disp('13= 180° Standard (r/D=1), threaded')
disp('14= Standard (r/D=1), flanged/welded')
disp('15= Long Radius (r/D=1.5), all types')
disp(' ')
for i=1:joelhos
linha=input(sprintf('%d° Joelho: ',i));
while ismember(linha,[1:15])==0
disp('Por favor repita.')
linha=input(sprintf('%d° Joelho: ',i));
end
escolha1(i,:)=tabela1(linha,:);

end
else
end

Ts=input('Essa parte da tubulacao apresenta quantos Ts? ');
if Ts~=0
disp('Identifique na tabela abaixo seu(s) T(s).')
disp('1 = Used as Elbows Standard, threaded')
disp('2 = Long Radius, threaded')
disp('3 = Standard, flanged/welded')
disp('4 = Stub-in branch')
disp('5 = Run-through Threaded')
disp('6 = Flanged/welded')
disp('7 = Stub-in branch')
disp(' ')
for i=1:Ts
linha=input(sprintf('%d° T: ',i));
while ismember(linha,[1:7])==0
disp('Por favor repita.')
linha=input(sprintf('%d° Joelho: ',i));
end
escolha2(i,:)=tabela2(linha,:);

end
else
```

```

end

valvulas=input('Essa parte da tubulacao apresenta quantas valvulas?
');
if valvulas~=0
disp('Identifique na tabela abaixo sua(s) valvula(s).')
disp('1 = Gate,ball or plug      Full line size, beta=1.0')
disp('2 =                        Reduced Trim, beta=0.9')
disp('3 =                        Reduced Trim, beta=0.8')
disp('4 = Globe                  Standard')
disp('5 =                        Angle or Y-type')
disp('6 = Diaphragm              Dam type')
disp('7 = Butterfly')
disp('8 = Check                  Lift')
disp('9 =                        Swing')
disp('10=                        Tilting disk')
disp(' ')
    for i=1:valvulas
        linha=input(sprintf('%d° Valvula: ',i));
        while ismember(linha,[1:10])==0
            disp('Por favor repita.')
            linha=input(sprintf('%d° Joelho: ',i));
        end
        escolha3(i,:)=tabela3(linha,:);
    end
else
end

pergunta=input('Considerar perdas na entrada e saida da tubulacao?
SIM=1; NAO=0: ');
while isscalar(pergunta)==0 || ismember(pergunta,0:1)== 0
    disp('Escolha invalida.')
    pergunta=input('Considerar perdas na entrada e saida da
tubulacao? SIM=1; NAO=0: ');
end
if pergunta==1
    escolha4=[0,0.5;0,1];
else
end

mais=input('Existe mais algum componente nao citado acima? Se sim
digite quantos e se nao digite 0: ');
if mais~=0
    for i=1:mais
        escolha5(i,1)=input(sprintf('Kf do %d° componente: ',i));
        escolha5(i,2)=input(sprintf('Kinf do %d° componente: ',i));
    end
else
end

escolha=[escolha1;escolha2;escolha3;escolha4;escolha5];
if isempty(escolha)==1
    escolha=[0 0];
else
end

```

Nome do arquivo: Mach_iso

```
function fobj=Mach_iso(Ma1)

global gamma d rug L Kinf

f=(4*log10(3.7*d/rug))^-2;
Klinha=4*f*L/d;
Ktotal=Kinf+Klinha;

fobj=log(1/(gamma*Ma1^2))-(1/(gamma*Ma1^2)-1)+Ktotal; % Equacao 4.83,
pagina 146
```

Nome do arquivo: Mach_adi

```
function fobj=Mach_adi(Ma1)

global L d rug Kinf gamma

f=(4*log10(3.7*d/rug))^-2; % Em caso de Re elevados
Klinha=4*f*L/d;
Kfittings=Kinf;
Ktotal=Kfittings+Klinha;

Y1=1+((gamma-1)/2)*Ma1^2; % Equacao 4.56, pagina 138
fobj=((gamma+1)/2)*log(2*Y1/((gamma+1)*Ma1^2))-(1/(Ma1^2)-1)+gamma*Ktotal; % equacao 4.67, pagina 140
```

Nome do arquivo: gaspipe

```
function fobj=gaspipe(T2)

global P1 P2 L d rug Kinf T1 gamma

f=(4*log10(3.7*d/rug))^-2; % Em caso de Re elevados
Klinha=4*f*L/d;
Kfittings=Kinf;
Ktotal=Kfittings+Klinha;

fobj=((gamma+1)/gamma)*log(P1*T2/(P2*T1))-((gamma-1)/(2*gamma))*(((P1*T2)^2-(P2*T1)^2)/(T2-T1))*(1/(T2*P1^2)-1/(T1*P2^2))+Ktotal;
% equacao 4.61, pagina 138
```

Apêndice B

Modelo de Dispersão

Nome do arquivo: dispersao

```
% Programacao dos Modelos de dispersao de gases
clear all
clc

global Qm A_y b_y c_y A_z b_z c_z Hr g u L0 H0 S0 deltaC0

disp('1 = Pasquill-Gifford - Puff com liberacao instantanea')
% a uma altura Hr do solo e sistema de coordenadas no ponto da
% liberacao, vento somente na direcao "x" com velocidade constante "u"
disp('2 = Pasquill-Gifford - Pluma com liberacao continua')
% e estacionaria a uma altura Hr do solo e vento somente na direcao
% "x" com velocidade constante "u"
disp('3 = Bureau of Mines - Dispersao de gas denso (Puff)')
disp('4 = Bureau of Mines - Dispersao de gas denso (Pluma)')
disp('5 = Britter & McQuaid - Dispersao de gas denso (Puff)')
disp('6 = Britter & McQuaid - Dispersao de gas denso (Pluma)')
disp('7 = Van Ulden - Dispersao de gas denso (Pluma)')
caso=input('Escolha seu caso: ');
while isscalar(caso)==0 || ismember(caso,1:7)==0
    disp('Escolha invalida.')
    caso=input('Escolha novamente seu caso: ');
end
disp(' ')
g=9.8; % Aceleracao da gravidade m/s2
Ta=300; %Considerou-se a temperatura ambiente 27oC

disp('Informe condicoes a seguir nas unidades pedidas:')
switch caso
case 1
    % Linhas de Input
    u=input('Velocidade do vento (m/s): ');
    DouN=input('Liberacao de DIA (=1) ou de NOITE (=2)? : ');
    Hr=input('Altura da liberacao em relacao ao solo (m): ');
    Qm=input('Quantidade do produto liberado (kg): ');
    Qm=Qm*1000*1000; %Passo para miligramas para aumentar a precisao do
    fsolve
    Cdado=input('Concentracao maxima do produto nao nociva a
populacao (mg/m3): ');
    % Linhas de Manipulacao de Dados
    SIGMA % programa separado que auxilia construcao das equacoes
dos sigmas
    options=optimset('Display','off','TolFun',1e-20);
    x0=5000; %Chute Inicial
    [distancia,desvio,flag,output]=fsolve(@(x) Cdado-
pasq_puff(x,0,0,0,1),x0,options);
    disp(' ')
    disp(sprintf('Distancia a evacuar na direcao do vento: %d
metros',round(distancia)))
    % Graficos
```

```

figure(1)
xl=2500:1:6000; yl=-400:1:400;
[X,Y]=meshgrid(xl,yl);
C=pasq_puff(X,Y,0,0,1);
[H,h]=contour(X,Y,C);
title('Concentracao ao nivel do solo (mg/m3) - Vento na
direcao X')
xlabel('X (m)'); ylabel('Y (m)'); clabel(H,h);
figure(2)
xl=100:1:1500; % Vetor distancia (metros)
tmin=min(xl)/u; tmax=max(xl)/u;
vet_t=linspace(tmin,tmax,5); % Vetor de tempos a serem
plotados (seg)
vet_t(1)=[]; % Retiro o primeiro pois a concentracao eh muito
alta
vet_t=round(vet_t./60); % Passando de seg para min (Para
colocar a legenda corretamente)
for i=1:length(vet_t)
    C1(i,:)=pasq_puff(xl,0,0,vet_t(i)*60,0);
end
C1(length(vet_t)+1,:)=pasq_puff(xl,0,0,0,1); % Plotando
tambem os pontos que movem com a nuvem

plot(xl,C1(1,:),xl,C1(2,:),xl,C1(3,:),xl,C1(4,:),xl,C1(5,:), '--
','LineWidth',2)
legend(sprintf('Tempo = %d min',vet_t(1)),sprintf('Tempo = %d
min',vet_t(2)),sprintf('Tempo = %d min',vet_t(3)),sprintf('Tempo = %d
min',vet_t(4)), 'Centro da nuvem')
title('Concentracao ao nivel do solo na direcao do vento')
xlabel('X (m)'); ylabel('Concentracao (mg/m3)');
axis([min(xl)+200 max(xl) 0 1.1*max(C1(1,:))])
save graf1 xl C1
case 2
% Linhas de Input
u=input('Velocidade do vento (m/s): ');
DouN=input('Liberacao de DIA (=1) ou de NOITE (=2)? : ');
RouU=input('O meio de dispersao eh RURAL (=1) ou URBANO
(=2)? : ');
Hr=input('Altura da liberacao em relacao ao solo (m): ');
Qm=input('Vazao de produto sendo liberado (kg/s): ');
Qm=Qm*1000*1000; %Passo para miligramas para aumentar a precisao do
fsolve
Cdado=input('Concentracao maxima do produto nao nociva a
populacao (mg/m3): ');
% Linhas de Manipulacao de Dados
SIGMA % programa separado que auxilia construcao das equacoes
dos sigmas
options=optimset('Display','off','TolFun',1e-20);
x0=1000; %Chute Inicial
[distancia,desvio,flag,output]=fsolve(@(x) Cdado-
pasq_pluma(x,0,0),x0,options);
disp(' ')
disp(sprintf('Distancia a evacuar na direcao do vento: %d
metros',round(distancia)))
% Graficos
figure(1)
x2=200:1:600; y2=-70:1:70;
[X,Y]=meshgrid(x2,y2);
C=pasq_pluma(X,Y,0);
[H,h]=contour(X,Y,C);

```

```

        title('Concentracao ao nivel do solo (mg/m3) - Vento na
direcao X')
        xlabel('X (m)'); ylabel('Y (m)'); clabel(H,h);
        figure(2)
        x2=0:1:700;
        C2=pasq_pluma(x2,0,0);
        plot(x2,C2)
        title('Concentracao ao nivel do solo na direcao do vento')
        xlabel('X (m)'); ylabel('Concentracao (mg/m3)');
        save graf2 x2 C2
    case 3
    % Linhas de Input
        u=input('Velocidade do vento (m/s): ');
        DouN=input('Liberacao de DIA (=1) ou de NOITE (=2)? : ');
        Hr=input('Altura da liberacao em relacao ao solo (m): ');
        Qm=input('Quantidade do produto liberado (kg): ');
        Qm=Qm*1000*1000; %Passo para miligramas para aumentar a precisao do
fsolve
        Cdado=input('Concentracao maxima do produto nao nociva a
populacao (mg/m3): ');
        % Linhas de Manipulacao de Dados
        SIGMA % programa separado que auxilia construcao das equacoes
dos sigmas
        options=optimset('Display','off','TolFun',1e-20);
        x0=10000; %Chute Inicial
        [distancia,desvio,flag,output]=fsolve(@(x) Cdado-
mines_puff(x,0,0,0,1),x0,options);
        disp(sprintf('Distancia a evacuar na direcao do vento: %d
metros',round(distancia)))
    % Graficos
        figure(1)
        x3=2500:1:6000; y3=-400:1:400;
        [X,Y]=meshgrid(x3,y3);
        C=mines_puff(X,Y,0,0,1);
        [H,h]=contour(X,Y,C);
        title('Concentracao ao nivel do solo (mg/m3) - Vento na
direcao X')
        xlabel('X (m)'); ylabel('Y (m)'); clabel(H,h);
        figure(2)
        x3=100:1:1500; % Vetor distancia (metros)
        tmin=min(x3)/u; tmax=max(x3)/u;
        vet_t=linspace(tmin,tmax,5); % Vetor de tempos a serem
plotados (seg)
        vet_t(1)=[]; % Retiro o primeiro pois a concentracao eh muito
alta
        vet_t=round(vet_t./60); % Passando de seg para min (Para
colocar a legenda corretamente)
        for i=1:length(vet_t)
            C3(i,:)=mines_puff(x3,0,0,vet_t(i)*60,0);
        end
        C3(length(vet_t)+1,:)=mines_puff(x3,0,0,0,1); % Plotando
tambem os pontos que movem com a nuvem

plot(x3,C3(1,:),x3,C3(2,:),x3,C3(3,:),x3,C3(4,:),x3,C3(5,:), '--
','LineWidth',2)
        legend(sprintf('Tempo = %d min',vet_t(1)),sprintf('Tempo = %d
min',vet_t(2)),sprintf('Tempo = %d min',vet_t(3)),sprintf('Tempo = %d
min',vet_t(4)), 'Centro da nuvem')
        title('Concentracao ao nivel do solo na direcao do vento')
        xlabel('X (m)'); ylabel('Concentracao (mg/m3)');
        axis([min(x3)+200 max(x3) 0 1.1*max(C3(1,:))])

```

```

        save graf3 x3 C3
    case 4
    % Linhas de Input
        u=input('Velocidade do vento (m/s): ');
        DouN=input('Liberacao de DIA (=1) ou de NOITE (=2)?: ');
        RouU=input('O meio de dispersao eh RURAL (=1) ou URBANO
(=2)?: ');
        Hr=input('Altura da liberacao em relacao ao solo (m): ');
        Qm=input('Vazao de produto sendo liberado (kg/s): ');
        Qm=Qm*1000*1000; %Passo para miligramas para aumentar a precisao do
fsolve
        Cdado=input('Concentracao maxima do produto nao nociva a
populacao (mg/m3): ');
        % Linhas de Manipulacao de Dados
        SIGMA % programa separado que auxilia construcao das equacoes
dos sigmas
        options=optimset('Display','off','TolFun',1e-20);
        x0=10000; %Chute Inicial
        [distancia,desvio,flag,output]=fsolve(@(x) Cdado-
mines_pluma(x,0,0),x0,options);
        disp(' ')
        disp(sprintf('Distancia a evacuar na direcao do vento: %d
metros',round(distancia)))
        % Graficos
        figure(3)
        x4=200:1:600; y4=-70:1:70;
        [X,Y]=meshgrid(x4,y4);
        C=mines_pluma(X,Y,0);
        [H,h]=contour(X,Y,C);
        title('Concentracao ao nivel do solo (mg/m3) - Vento na
direcao X')
        xlabel('X (m)'); ylabel('Y (m)'); clabel(H,h);
        figure(2)
        x4=0:1:700;
        C4=mines_pluma(x4,0,0);
        plot(x4,C4)
        title('Concentracao ao nivel do solo na direcao do vento')
        xlabel('X (m)'); ylabel('Concentracao (mg/m3)');
        save graf4 x4 C4
    case 5
        ro0=input('Densidade inicial do material liberado (kg/m3):
'); roar=1.22; %kg/m3
        g0=g*(ro0-roar)/roar; % fator de flutuacao inicial (m/s2)
        V0=input('Volume inicial de gas denso liberado (m3): ');
        Di=V0^(1/3); %dimensao caracteristica para liberacoes
instantaneas (m)
        u=input('Velocidade do vento a 10m do solo (m/s): ');
        criterio=sqrt(g0*V0)/(u*Di);
        if criterio>=0.20
            disp('Modelo do Gas Denso se aplica.')
        else
            disp('Modelo do Gas Denso NAO se aplica.')
        end
        C0=input('Concentracao do material antes do vazamento
(mg/m3): ');
        Cm=0.001*C0;
        CORRELACAO
        if erro~=1
            disp(sprintf('Concentracao minima onde o modelo ainda eh
valido: %d mg/m3',Cm))

```

```

disp(sprintf('Distancia na direcao do vento para essa
concentracao: %d metros',round(distancia)))
% Graficos
for i=1:length(razoes)
Cm=razoes(i)*C0;
CORRELACAO
x5(i)=distancia;
end
C5=razoes*C0;
plot(x5,C5,'bx--','MarkerSize',8,'LineWidth',2)
title('Concentracao ao nivel do solo na direcao do vento')
xlabel('X (m)'); ylabel('Concentracao (mg/m3)');
save graf5 x5 C5
else
end
case 6
ro0=input('Densidade inicial do material liberado (kg/m3):
'); roar=1.22; %kg/m3
g0=g*(ro0-roar)/roar; %fator de flutuacao inicial (m/s2)
Qm=input('Vazao de produto sendo liberado (kg/s): ');
q0=Qm/ro0; %Fluxo volumetrico inicial da pluma (m3/s)
u=input('Velocidade do vento a 10m do solo (m/s): ');
Dc=(q0/u)^(1/2); %dimensao caracteristica para liberacoes
continuas (m)
criterio=((g0*q0)/((u^3)*Dc))^(1/3);
if criterio>=0.15
disp('Modelo do Gas Denso se aplica.')
else
disp('Modelo do Gas Denso NAO se aplica.')
end
C0=input('Concentracao do material antes do vazamento
(mg/m3): ');
Cm=0.002*C0;
CORRELACAO
if erro~=1
disp(sprintf('Concentracao minima onde o modelo ainda eh
valido: %d mg/m3',Cm))
disp(sprintf('Distancia na direcao do vento para essa
concentracao: %d metros',round(distancia)))
% Graficos
for i=1:length(razoes)
Cm=razoes(i)*C0;
CORRELACAO
x6(i)=distancia;
end
C6=razoes*C0;
plot(x6,C6,'bx--','MarkerSize',5,'LineWidth',1.5)
title('Concentracao ao nivel do solo na direcao do vento')
xlabel('X (m)'); ylabel('Concentracao (mg/m3)');
save graf6 x6 C6
else
end
case 7
% Entradas, consideracoes e preparacoes
D=input('Diamentro do furo (m): ');
L0=(D/4)*sqrt(pi); % Quadrado de mesma area que o circulo
H0=2*L0;
S0=2*L0*H0; % ou (pi*D^2)/4
ro0=input('Densidade inicial do material liberado (kg/m3):
'); roar=1.22; %kg/m3
deltaC0=(ro0-roar)/ro0; % densidade reduzida

```



```

        u=input('Velocidade do vento (m/s): ');
        u_atrito=u*10/100; % Velocidade de atrito. Aproximacao feita.
        Hmax=(4*roar*u_atrito^2)/((ro0-roar)*g); % Criterio de
transicao % Eq 15.26.14a
        % Calculos
        Lmax=H0*L0/Hmax; % L de transicao
        tmax=(Lmax^1.5-L0^1.5)/(1.5*sqrt(g*S0*deltaC0/2)); % tempo de
transicao
        xmax=tmax*u; % distancia de transicao
        disp(sprintf('Distancia maxima onde o modelo eh considerado:
%d m',xmax))
        % Grafico
        x=linspace(0,xmax,300); x=x';
        [L,H,uy]=VanUlden_pluma(x);
        plot(x,2.*L,x,H,'LineWidth',1.5)
        legend('Largura','Altura')
        title('Variacao da Largura e Altura')
        xlabel('X (m)'); ylabel('Tamanho (m)');
end

```

Nome do arquivo: CORRELACAO

```

erro=0;
if caso==6
% Tabela 5.4 - Pluma
% Escolha de qual linha usar na tabela 5.4
razoes=[0.1 0.05 0.02 0.01 0.005 0.002];
razao=Cm/C0;
dif=abs(razoes-razao);
linha=find(dif==min(dif)); %vendo qual das razoes se aproxima mais da
minha
% Calculo do ALFA
alfa=log10(((g0^2)*q0/(u^5))^(1/5));
% Dados da tabela
range_alfa=[-0.55 -0.55 -0.14;-0.68 -0.29 -0.18;-0.69 -0.31 -0.16;-
0.70 -0.29 -0.20;-0.67 -0.28 -0.15;-0.69 -0.25 -0.13];
coef_beta=[0 1.75 0.24 1.88 0.24 1.88 -0.50 1.78;0 1.92 0.36 2.16 0
2.06 -0.56 1.96;0 2.08 0.45 2.39 0 2.25 -0.54 2.16;0 2.25 0.49 2.59 0
2.45 -0.52 2.35;0 2.40 0.59 2.80 0 2.63 -0.49 2.56;0 2.6 0.39 2.87 0
2.77 -0.50 2.71];
% Calculo do BETA
if alfa<=range_alfa(linha,1)
    beta=coef_beta(linha,1)*alfa+coef_beta(linha,2);
elseif alfa>range_alfa(linha,1) && alfa<=range_alfa(linha,2)
    beta=coef_beta(linha,3)*alfa+coef_beta(linha,4);
elseif alfa>range_alfa(linha,2) && alfa<=range_alfa(linha,3)
    beta=coef_beta(linha,5)*alfa+coef_beta(linha,6);
elseif alfa>range_alfa(linha,3) && alfa<=1
    beta=coef_beta(linha,7)*alfa+coef_beta(linha,8);
else
    disp('Os dados fornecidos nao estao dentro dos limites do modelo
Britter-McQuaid. Alfa>1.')
    erro=1;
end
if erro~=1;

```

```

    distancia=(10^beta)*sqrt(q0/u);
    else
    end

else
% Tabela 5.5 - Puff
% Escolha de qual linha usar na tabela 5.5
razoes=[0.1 0.05 0.02 0.01 0.005 0.002 0.001];
razao=Cm/C0;
dif=abs(razoes-razao);
linha=find(dif==min(dif)); %vendo qual das razoes se aproxima mais da
minha
% Calculo do ALFA
alfa=log10((g0*(V0^(1/3))/(u^2))^(1/2));
% Dados da tabela
range_alfa=[-0.44 0.43; -0.56 0.31;-0.66 0.32; -0.71 0.37; -0.52
0.24; 0.27 0.27; -0.10 -0.10];
coef_beta=[0 0.70 0.26 0.81 0 0.93; 0 0.85 0.26 1.0 -0.12 1.12; 0
0.95 0.36 1.19 -0.26 1.38; 0 1.15 0.34 1.39 -0.38 1.66; 0 1.48 0.26
1.62 -0.30 1.75; 0 1.83 0 1.83 -0.32 1.92; 0 2.075 0 2.075 -0.27
2.05];
% Calculo do BETA
if alfa<=range_alfa(linha,1)
    beta=coef_beta(linha,1)*alfa+coef_beta(linha,2);
elseif alfa>range_alfa(linha,1) && alfa<=range_alfa(linha,2)
    beta=coef_beta(linha,3)*alfa+coef_beta(linha,4);
elseif alfa>range_alfa(linha,2) && alfa<=1
    beta=coef_beta(linha,5)*alfa+coef_beta(linha,6);
else
    disp('Os dados fornecidos nao estao dentro dos limites do modelo
Britter-McQuaid. Alfa>1.')
    erro=1;
end
    if erro~=1;
    distancia=(10^beta)*(V0^(1/3));
    else
    end
end
end

```

Nome do arquivo: SIGMA

```

% Tabela 5.1 - Associando as classes de estabilidade A=1, B=2, C=3,
D=4, E=5, F=6.
% Linhas da tabela 5.1 - velocidade do vento
if u<=2
    grupo_vel=1;
elseif u>2 && u<=3
    grupo_vel=2;
elseif u>3 && u<=4
    grupo_vel=3;
elseif u>4 && u<=6
    grupo_vel=4;
else
    grupo_vel=5;
end
end

```

```

% Colunas da tabela 5.1 (considera-se aqui o caso mais pessimista)
if DouN==1
    D=[1 1 2 3 3]; %dia
    classe=D(grupo_vel);
else
    N=[6 6 5 4 4]; %noite
    classe=N(grupo_vel);
end

% Tabelas 5.2 e 5.3
if caso==1 || caso==3 % Casos de puff - 5.3
    % equacao -> sigma=A*(x^b)
    sigma_puff_y=[0.18 0.92;0.14 0.92;0.10 0.92;0.16 0.92;0.14
0.92;0.02 0.89];
    sigma_puff_z=[0.60 0.75;0.53 0.73;0.34 0.71;0.15 0.70;0.10
0.65;0.05 0.61];
    A_y=sigma_puff_y(classe,1);
    b_y=sigma_puff_y(classe,2);
    A_z=sigma_puff_z(classe,1);
    b_z=sigma_puff_z(classe,2);
elseif caso==2 || caso==4 % Casos de pluma - 5.2
    if RouU==1 % Rural
        % equacao -> sigma=A*x*(1+b*x)^c
        sigma_pluma_y=[0.22;0.16;0.11;0.08;0.06;0.04];
        sigma_pluma_z=[0.20 0 0;0.12 0 0;0.08 0.0002 -0.5;0.06 0.0015
-0.5;0.03 0.0003 -1;0.016 0.0003 -1];
        A_y=sigma_pluma_y(classe);
        b_y=0.0001;
        c_y=-0.5;
        A_z=sigma_pluma_z(classe,1);
        b_z=sigma_pluma_z(classe,2);
        c_z=sigma_pluma_z(classe,3);
    else %Urbano
        % equacao -> sigma=A*x*(1+b*x)^c
        sigma_pluma_y=[0.32;0.32;0.22;0.16;0.11;0.11];
        sigma_pluma_z=[0.24 0.0001 0.5;0.24 0.0001 0.5;0.20 0 0;0.14
0.0003 -0.5;0.08 0.0015 -0.5;0.08 0.0015 -0.5];
        A_y=sigma_pluma_y(classe);
        b_y=0.0004;
        c_y=-0.5;
        A_z=sigma_pluma_z(classe,1);
        b_z=sigma_pluma_z(classe,2);
        c_z=sigma_pluma_z(classe,3);
    end
end
else
end

```

Nome do arquivo: pasq_puff

```
function fobj=pasq_puff(x,y,z,t,opcao)
```

```
global Qm A_y b_y A_z b_z Hr u
```

```

sigma_y=A_y.*(x.^b_y);
sigma_x=sigma_y;
sigma_z=A_z.*(x.^b_z);

% Equacao 5.54 da pagina 193
fobj=(Qm./(sqrt((2.*pi).^3).*sigma_x.*sigma_y.*sigma_z)).*exp((-
0.5.*(y./sigma_y).^2)).*(exp(-0.5.*((z-Hr)./sigma_z).^2)+exp(-
0.5.*((z+Hr)./sigma_z).^2));

if opcao==0; % Se for para coordenadas fixas no ponto da liberacao
    fobj=fobj.*exp(-0.5.*((x-u.*t)./sigma_x).^2);
else % Se for coordenadas que movem com a nuvem (ex. para otimizacao
e grafico de isopletas)
end

```

Nome do arquivo: pasq_pluma

```

function fobj=pasq_pluma(x,y,z)

global Qm A_y b_y c_y A_z b_z c_z u Hr

sigma_y=A_y.*x.*(1+b_y.*x).^c_y;
sigma_z=A_z.*x.*(1+b_z.*x).^c_z;

fobj=(Qm./(2.*pi.*sigma_y.*sigma_z.*u)).*exp((-
0.5.*(y./sigma_y).^2)).*(exp(-0.5.*((z-Hr)./sigma_z).^2)+exp(-
0.5.*((z+Hr)./sigma_z).^2));

```

Nome do arquivo: mines_puff

```

function fobj=mines_puff(x,y,z,t,opcao)

global Qm A_y b_y Hr u

sigma_y=A_y.*(x.^b_y);
sigma_x=sigma_y;
sigma_z=0.2.*sigma_y;

fobj=(Qm./(sqrt((2.*pi).^3).*sigma_x.*sigma_y.*sigma_z)).*exp((-
0.5.*(y./sigma_y).^2)).*(exp(-0.5.*((z-Hr)./sigma_z).^2)+exp(-
0.5.*((z+Hr)./sigma_z).^2));

if opcao==0; % Se for para coordenadas fixas no ponto da liberacao
    fobj=fobj.*exp(-0.5.*((x-u.*t)./sigma_x).^2);
else % Se for coordenadas que movem com a nuvem (ex. para otimizacao
e grafico de isopletas)
end

```

Nome do arquivo: mines_pluma

```
function fobj=mines_pluma(x,y,z)

global Qm A_y b_y c_y u Hr

sigma_y=A_y.*x.*(1+b_y.*x).^c_y;
sigma_z=0.2.*sigma_y;

fobj=(Qm./(2.*pi.*sigma_y.*sigma_z.*u)).*exp((-
0.5.*(y./sigma_y).^2)).*(exp(-0.5.*((z-Hr)./sigma_z).^2)+exp(-
0.5.*((z+Hr)./sigma_z).^2));
```

Nome do arquivo: VanUlden_pluma

```
function [L,H,uy]=VanUlden_pluma(x)

global g u L0 H0 S0 deltaC0

t=x./u;
L=(L0.^1.5+1.5.*sqrt(g.*S0.*deltaC0./2).*t).^(2/3);
H=H0.*L0./L;
uy=sqrt(g.*S0.*deltaC0./2./L);
```