33º CONGRESSO DA ABES
Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental
FITABES 2025
Feira Internacional de Tecnologias de Saneamento Ambiental

776 - ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA COBERTURA DE NUVENS E UMIDADE ATMOSFÉRICA SOBRE A DISPERSÃO DE AMÔNIA EMPREGANDO O SIMULADOR ALOHA

Felipe Sombra dos Santos[(1)]
Engenheiro Químico pela PUC-Rio. Mestre em Engenharia Metalúrgica e de Materiais na área de Engenharia de Processos e Meio Ambiente pela PUC-Rio. Especialista em Engenharia Sanitária e Ambiental pela Escola Nacional de Saúde Pública da Fundação Osvaldo Cruz (FIOCRUZ). Doutor em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da UFRJ. Professor Adjunto do Departamento de Engenharia Bioquímica da Escola de Química da UFRJ.
Ricardo Vitor Costa Limoeiro[(2)]
Engenheiro Químico (UFRJ).
João Victor Marques de Queiroz[(3)]
Possui graduação em Engenharia Química pela Universidade Federal do Rio de Janeiro (2022), mestrado em Engenharia Química pela Universidade Federal do Rio de Janeiro (2024) e atualmente é doutorando em Engenharia Química pela Universidade Federal do Rio de Janeiro
Kese Pontes freitas Alberton[(4)]
Professora do Departamento de Engenharia Química da UFRJ, onde desenvolve atividades e ministra aulas relacionadas a Segurança e Engenharia de Processos. Faz parte do Grupo de Integração de Processos Químicos - GIPQ/UFRJ e é colaboradora do Laboratório de Desenvolvimento de Softwares da COPPE/UFRJ. É co-fundadora e orientadora da liga acadêmica de computação da Escola de Química for_code. Atua na área de Sistemas de Alívio e Segurança, Simuladores de Processos, Modelagem e Otimização de Processos

Endereço[(1)]**:** Av. Athos da Silveira Ramos, 149 - Cidade Universitária, Rio de Janeiro - 21941-909 - Brasil - Tel: +55 (21) 3938-7600 - e-mail: fsombra@eq.ufrj.br

RESUMO

A amônia é uma molécula muito importante e a sua manipulação requer cuidados especiais por conta de sua natureza tóxica. A sua dispersão foi estudada no presente trabalho através da análise da influência da cobertura das nuvens e da umidade relativa do ar na forma de liberação instantânea e como *Boiling Liquid Expanding Vapor Explosion* (BLEVE), ambos simulando condições iguais ao maior acidente da história envolvendo a liberação de amônia na atmosfera. Para o caso de liberação instantânea, a cobertura das nuvens apresentou impacto na dispersão da amônia, onde uma menor cobertura de nuvens gerou um alcance maior das zonas de concentração de amônia por conta de sua influência na turbulência atmosférica no modelo de dispersão estudado. O pior cenário avaliado pelo simulador indica que para as condições estudadas é possível que moléculas de amônia sejam encontradas a distâncias superiores a 10 quilômetros de distância da fonte emissora. Já no caso de liberação via BLEVE, a influência maior no modelo de dispersão mostrou ser feita pela umidade do ar, onde uma maior umidade do ar foi responsável por uma menor extensão da zona de choque da explosão. Para uma umidade relativa do ar de 100%, a potência da explosão pôde influenciar uma região de até 474 metros da fonte, enquanto que uma umidade relativa do ar de 20% representou uma extensão do impacto a 497 metros.

PALAVRAS-CHAVE: Amônia, dispersão atmosférica, ALOHA.

INTRODUÇÃO

A amônia é o segundo produto químico mais produzido globalmente, só perdendo para o ácido sulfúrico. Foi inicialmente produzida através do Processo Haber-Bosch, no qual são utilizados os gases nitrogênio e hidrogênio. Esse processo é responsável pela produção de cerca de 98% da amônia no mundo, anualmente. A amônia é indispensável para a humanidade sendo utilizada principalmente como fonte de nitrogênio para a produção de fertilizantes (YUZBASIOGLU, AVSAR e GEZERMAN, 2022). No Brasil, para o ano de 2025, a PETROBRAS anunciou a reativação da fábrica de fertilizantes Araucária Nitrogenados S.A. (ANSA), cuja capacidade produtiva é de 475 mil toneladas de amônia por ano, dentre outros produtos (PETROBRAS, 2024).

Os diversos poluentes dispersos no ar atmosférico favorecem o enfoque à qualidade do ar como um fator primordial a ser observado para o cuidado com a saúde pública. O aumento desses poluentes fez com que o monitoramento da qualidade do ar fosse instaurado como um mecanismo de proteção à saúde, mapeando riscos e criando um histórico de concentração de poluentes como material particulado, monóxido de carbono, NO_x e SO_x (VORMITTAG, CIRQUEIRA, NETO e SALDIVA, 2021).

A dispersão atmosférica refere-se à propagação de poluentes na atmosfera, que pode ocorrer de forma natural, por exemplo o caso de erupções vulcânicas, e como resultado de atividades humanas, por exemplo a queima de combustíveis fósseis e a liberação de substâncias tóxicas durante acidentes industriais (ALBERTON, 2020).

Apesar de não ser ativamente monitorada pelas estações de monitoramento de ar, dentre os diversos poluentes atmosféricos, a amônia (NH_3) apresenta potenciais riscos quanto à sua dispersão não controlada para o meio ambiente (NG, LIU, LAM e YANG, 2023). Encontrada majoritariamente próxima às plantações por conta de seu extensivo uso na agricultura, como já mencionado, a amônia é volátil e pode se dispersar facilmente na atmosfera, podendo ocasionar danos aos ecossistemas terrestres e aquáticos, além de representar um perigo à saúde respiratória dos indivíduos em caso de uma exposição (UNIGEL, 2021).

O manuseio de amônia requer cuidados especiais uma vez que o contato com a substância pode causar sérios danos à saúde humana como irritações nas mucosas, queimaduras e, em maiores concentrações, a morte (WYER, KELLEGHAN, VIDAL, SCHAUBERGER e CURRAN, 2022).

O maior acidente mundial relativo à dispersão de amônia ocorreu em 1992 em Dakar, no Senegal, onde a explosão de um tanque liberou uma névoa de amônia que foi responsável pela morte de 129 pessoas e 1.150 feridos (DHARMAVARAM e PATTABATHULA. 2023).

OBJETIVOS

Visando avaliar os possíveis impactos causados pela variação das condições atmosféricas no vazamento de amônia na planta da ANSA, no Paraná, o presente trabalho utilizou o software gratuito ALOHA para simular os impactos das variações de umidade relativa do ar e cobertura das nuvens na dispersão de 22 toneladas de amônia em dois cenários: (i) Em um curto espaço de tempo na região de forma similar ao acidente ocorrido no Senegal; (ii) Na explosão de um tanque cilíndrico de 2,2 m de diâmetro, parede de 11 mm de espessura e volume de 33,5 m^3 onde 80% da massa foi perdida para a bola de fogo.

METODOLOGIA UTILIZADA

A simulação foi realizada empregando o software gratuito ALOHA, da Agência Ambiental dos Estados Unidos, para avaliar os cenários propostos considerando fatores ambientais como umidade relativa do ar, velocidade do vento, temperatura, localização e cobertura das nuvens. A simulação foi criada com parâmetros fixos de localização 25º 34’ S e 49º 22’ W segundo o Google Maps (Figura 1).

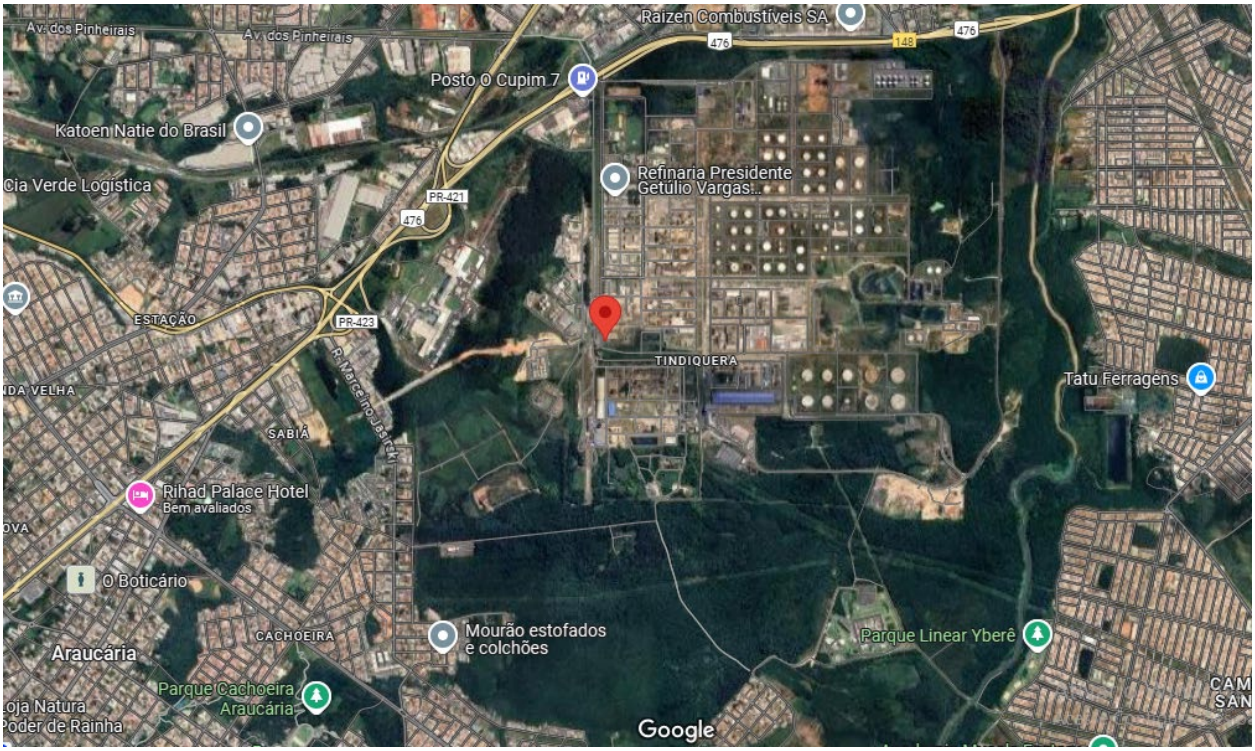

Figura 1: Mapa via satélite da ANSA, ao lado da Refinaria Presidente Getúlio Vargas.

Levou-se ainda em consideração a elevação do terreno de 897 m acima do nível do mar, velocidade do vento a 2 m/s este com altura da fonte igual a 3,0 m em um terreno urbano com temperatura do ar igual a 18 °C (WEATHER SPARK, 2024).

O modelo de dispersão gaussiano foi sugerido pelo simulador para as condições de terreno, molécula, temperatura e velocidade do vento informadas, sendo os dados de velocidade do vento e temperatura selecionados os predominantes da região durante o ano. Dentro das opções de terreno, sendo elas terreno aberto, mar aberto e urbano ou floresta, a classificação "urbano ou floresta" foi selecionada por melhor representar a geografia local.

O modelo gaussiano, proposto por Pasquill e posteriormente otimizado por Gifford, trata a dispersão atmosférica como um processo gaussiano, assumindo que o poluente se dispersa seguindo uma distribuição normal (PASQUILL, 1990) (Figura 2).

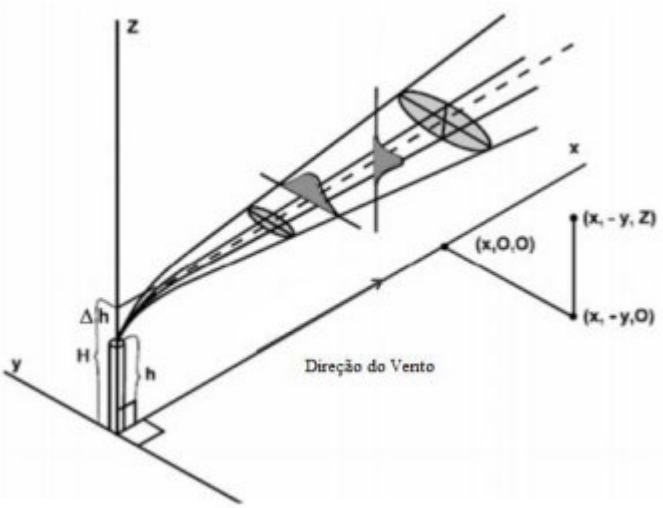

Figura 2: Modelo gaussiano de dispersão de puff em ar.

Os dados de temperatura, velocidade e direção do vento foram escolhidos com base nos valores médios obtidos para a localidade durante o ano, sendo estes parâmetros fixos durante a simulação para possibilitar a comparação dos dados obtidos.

O intuito de analisar exclusivamente o impacto dos fatores ambientais nas previsões de dispersão atmosférica, diferentes simulações foram geradas variando a cobertura das nuvens e a umidade atmosférica.

Através da variação das condições atmosféricas de umidade relativa do ar em 20%, 60% e 100%, além da variação da cobertura das nuvens em céu limpo, parcialmente coberto e coberto, foi possível a identificação de 9 cenários associados à dispersão de amônia para as referidas condições. Nos cenários do caso (i) (Figura 3) cada par (umidade do ar, cobertura das nuvens) caracteriza um experimento realizado via simulação. De maneira similar, os cenários do caso (ii) (Figura 4) apresentam as mesmas divisões.

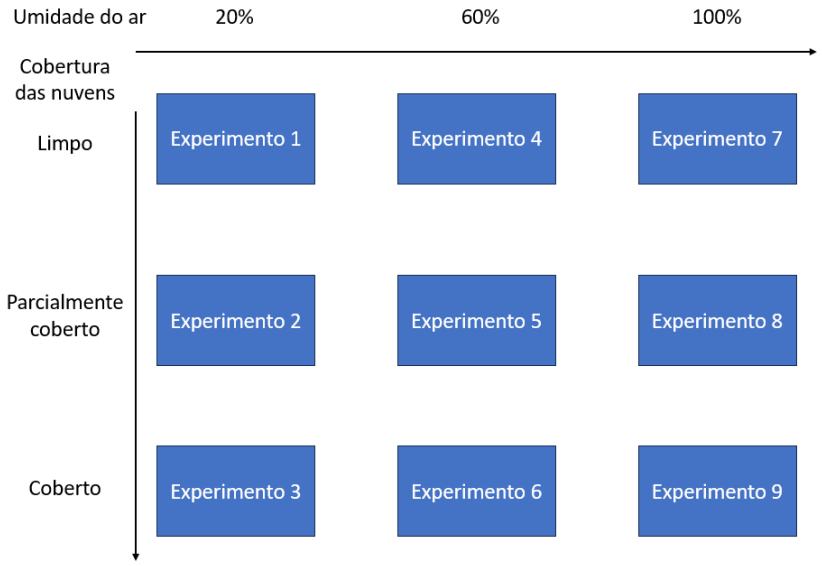

Figura 3: Condições atmosféricas simuladas para o primeiro caso.

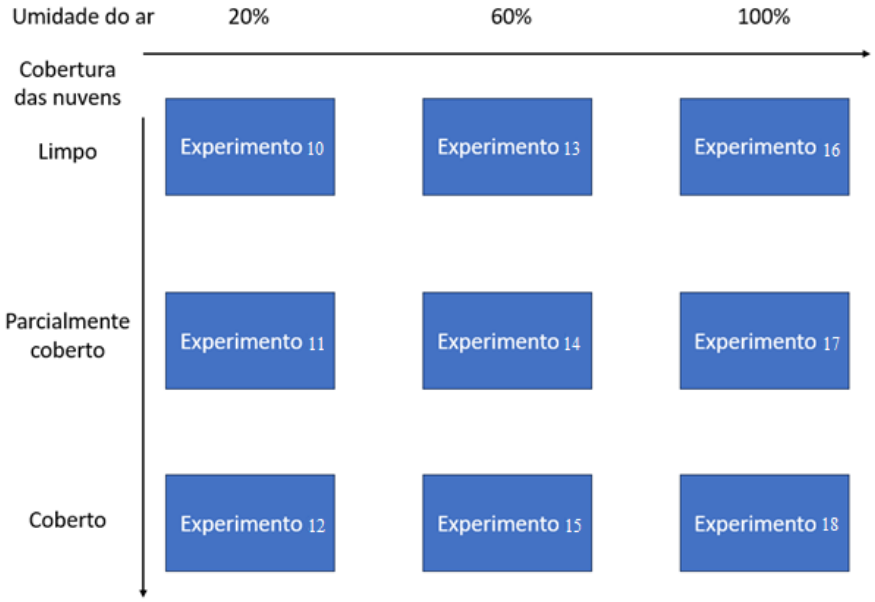

Figura 4: Condições atmosféricas simuladas para o segundo caso.

O programa foi capaz de calcular e especificar três zonas distintas de concentração de amônia para o cenário (i) segundo a sua base de dados, sendo elas a vermelha, laranja e amarela, observado na Tabela 1. De maneira similar, para o cenário (ii) o software realizou a divisão da área afetada em três zonas distintas em função da

potência da explosão, sendo elas a vermelha, laranja e amarela, observadas na Tabela 2.

Tabela 1: Concentração de amônia nas zonas de segurança do modelo de liberação instantânea.

Zona	Concentração ($mg.L^{-1}$)
Vermelha	$x \geq 1.100$
Laranja	$30 < x < 1.100$
Amarela	$x \leq 30$

Tabela 2: Potência da explosão nas zonas de segurança para o modelo BLEVE.

Zona	Radiação ($kW.m^{-2}$)
Vermelha	$x \geq 10$
Laranja	$2 < x < 10$
Amarela	$x \leq 2$

Com os dados obtidos através de cada simulação foi então possível a avaliação dos impactos das variações das condições atmosféricas para ambos os cenários.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Através das simulações do caso (i) foi possível observar que os resultados obtidos para as zonas de concentração se mantiveram inalterados para diferentes cenários de umidade relativa do ar, onde para um mesmo grupo de cobertura de nuvens (limpo, parcialmente coberto ou coberto) encontrou-se o mesmo alcance de dispersão para diferentes valores de umidade do ar. Os resultados ainda indicam que para um céu limpo, ou parcialmente coberto, a zona vermelha de concentração (superior a 1.100 ppm) atingiu 2,3 quilômetros, enquanto a zona laranja (entre 30 e 1.100 ppm) atingiu 5 quilômetros e a amarela (inferior a 30 ppm), 10 quilômetros. Para o céu completamente coberto a zona vermelha atingiu 1,5 quilômetros, enquanto a laranja atingiu 2,9 quilômetros e a amarela atingiu 5,4 quilômetros.

De posse desses resultados foi possível concluir que a cobertura das nuvens influencia diretamente na classe de estabilidade atmosférica, alterando a forma com a qual ocorre a dispersão do poluente na atmosfera (Figura 5 e 6).

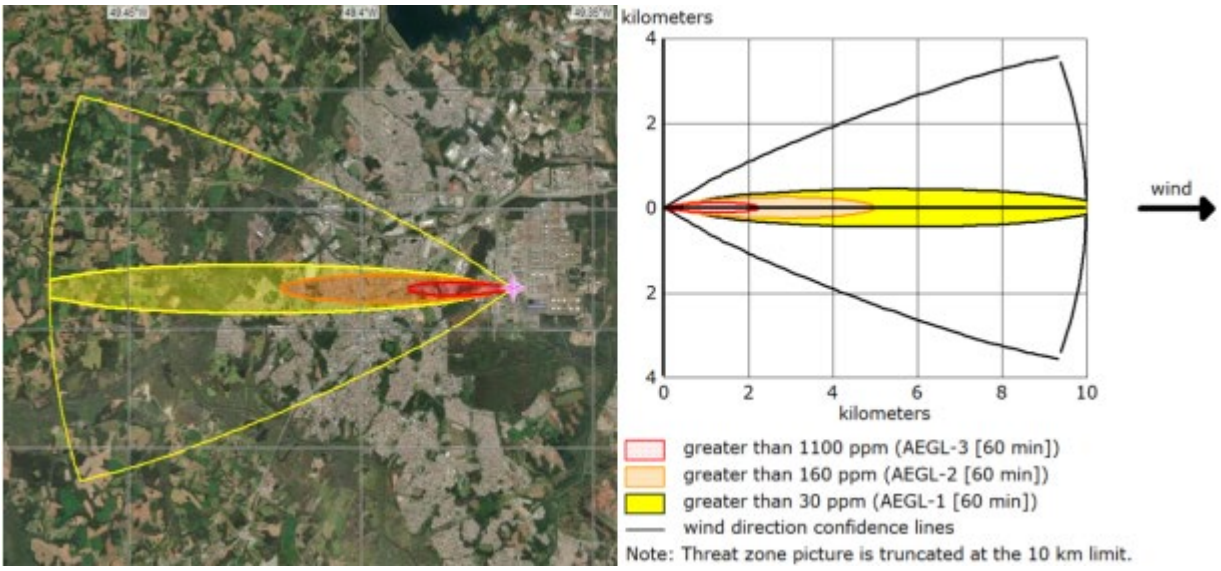

Figura 5: Experimento 1, onde no caso (i) simulou-se a dispersão com umidade do ar igual a 20% e céu limpo.

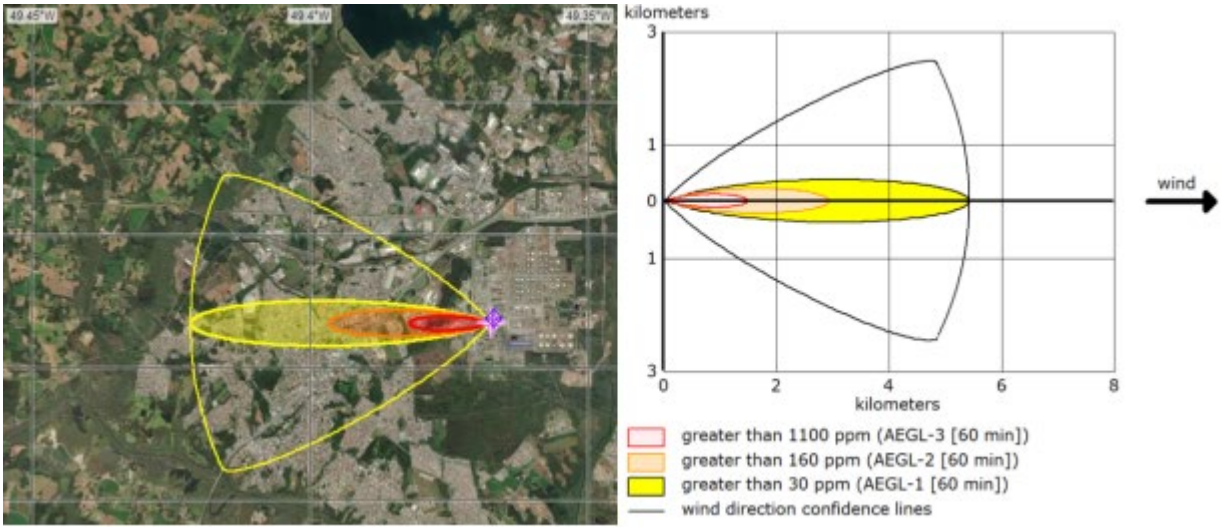

Figura 6: Experimento 9, onde no caso (i) simulou-se a dispersão com umidade do ar igual a 20% e céu limpo.

No caso (ii), os resultados apontaram que a cobertura das nuvens não teve impacto significativo na dispersão da amônia para as referidas condições. Para os experimentos realizados com 20% de umidade relativa do ar, as extensões das zonas de potência foram: zona vermelha (superior a 10 $kW.m^{-2}$) com 218 metros, zona laranja (entre 2 e 10 $kW.m^{-2}$) com 314 metros e zona amarela (inferior a 2 $kW.m^{-2}$) com 497 metros. Em condições de umidade relativa do ar igual a 60%, a zona vermelha apresentou 207 metros de extensão, enquanto a zona laranja apresentou 300 metros e a zona amarela, 474 metros. Já para a umidade relativa de 100%, a zona vermelha atingiu uma extensão máxima de 202 metros, a zona laranja, 292 metros e a zona amarela, 462 metros.

Os resultados indicam que diferente do caso (i), a cobertura das nuvens não apresentou impacto no modelo BLEVE, enquanto que a umidade relativa do ar impactou diretamente na explosão, onde uma umidade maior gerou uma menor extensão da zona impactada (Figuras 7 e 8).

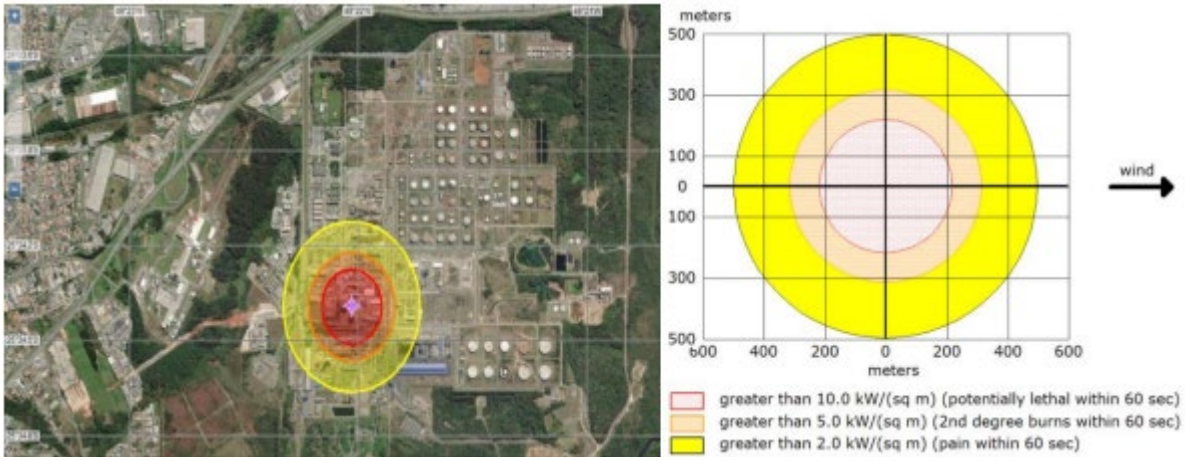

Figura 7: Experimento 10, onde para o caso (ii) simulou-se a dispersão com a umidade do ar igual a 20% e céu limpo.

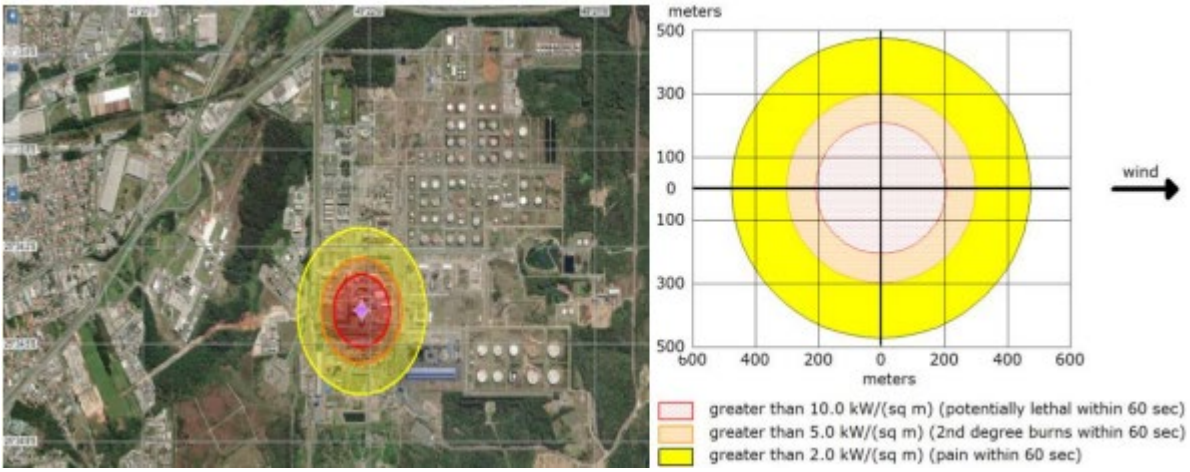

Figura 8: Experimento 14, onde para o caso (ii) simulou-se a dispersão com a umidade do ar igual a 100% e céu limpo.

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

A dispersão da pluma de amônia é influenciada por diversos fatores como a sua taxa de liberação, velocidade do ar e altura da pluma, de forma que a topologia do local influencia diretamente na dispersão dos vapores tóxicos.

Análise dos resultados da simulação de dispersão atmosférica via ALOHA revelou que a variação do fator de umidade relativa da atmosfera não contabilizou influência expressiva no comportamento da nuvem de toxicidade previstas no modelo proposto.

Em contrapartida, a variação do fator cobertura das nuvens o que consequentemente afeta a turbulência atmosférica, impactou diretamente o alcance da toxicidade da amônia liberada. Desta forma, para valores de percentual de menor cobertura de nuvens foi observado que ocorreu uma maior dispersão da amônia liberada.

Os resultados das simulações com cenários de liberação instantânea mostraram valores semelhantes para a dispersão atmosférica da amônia, indicando que a umidade relativa não teve interferência significativa ou que sua influência foi mínima, possivelmente devido a erros de truncamento do programa de simulação.

No pior cenário analisado, foi sugerida a presença de amônia a mais de 10 quilômetros da fonte de contaminação. No entanto, o modelo do simulador não considera a reação da amônia com ácidos atmosféricos, o que pode gerar material particulado.

A simulação levou em conta a liberação instantânea de 22 toneladas de amônia no intervalo de tempo de 1 minuto, mostrando que o simulador não leva em consideração os fatores da cobertura das nuvens e a umidade atmosférica relativa durante a liberação.

Para a modelagem de dispersão atmosférica em cenários de explosão do tipo BLEVE, os resultados indicaram que a umidade relativa do ar é um fator relevante, influenciando o alcance da frente de choque e da reação. Notou-se que maiores teores de umidade resultaram em uma dispersão reduzida da explosão simulada. Por outro lado, a cobertura de nuvens não demonstrou impacto expressivo nos resultados desses cenários.

Para esse modelo é possível ainda observar-se que o software trata como eventos independentes a dispersão atmosférica dos gases tóxicos e a explosão ocorrida no cenário. No presente estudo, 80% da amônia foi consumida na explosão, então o ALOHA trata a dispersão dos 20% restantes como uma liberação instantânea da referida massa de amônia.

Como sugestão para trabalhos futuros, recomenda-se analisar a influência de outros fatores ambientais, como a velocidade do vento, a altura da fonte de liberação, além das características do relevo e da cobertura do solo, sobre o comportamento da dispersão atmosférica. Além disso, é pertinente avaliar se as previsões do ALOHA estão alinhadas com dados experimentais disponíveis na literatura.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

DHARMAVARAM, S; PATTABATHULA, V. Learning from the Worst Ammonia Accident. *American*

Institute of Chemical Engineers , 01 de jul. de 2023. Disponível em: https://www.aiche.org/resources/publications/cep/2023/july/learning-worst-ammonia-accident

Google Maps, 2024. Disponível em: https://www.google.com/maps/place/25%C2%B034'24.0%22S+49%C2%B022'12.0%22W/@-25.5745043,-49.3723235,693m/data=!3m1!1e3!4m4!3m3!8m2!3d-25.5733333!4d-49.37?entry=ttu&g_ep=EgoyMDI1MDEwMi4wIKXMDSoASAFQAw%3D%3D

KESE, K. P. F. Segurança de Processos. *Segurança de Processos e Prevenção de Perdas*. 2020.

NG, C. K. L.; LIU, M.; LAM, J. S. L.; YANG, M. Accidental release of ammonia during ammonia booking: Dispersion behaviour under the influence of operational and weather conditions in Singapore. *Journal of Hazardous Materials*, 2023, p. 131281.

PASQUILL, G. A. A modified power law presentation of the Pasquill-Gifford dispersion coefficients. *Journal of the Air & Waste Management Association*, v. 40, n. 8, p. 1146-1147, 1990.

PETROBRAS – Petróleo Brasileiro. Petrobras aprova reativação da fábrica de fertilizantes de Araucária (PR). *Agência Petrobras*, Paraná, 06 de jun. de 2024. Disponível em: https://agencia.petrobras.com.br/w/negocio/petrobras-aprova-reativacao-da-fabrica-de-fertilizantes-de-araucaria-pr-

UNIGEL. Ficha de Informações de Segurança de Produtos Químicos, Rio de Janeiro, 11 de jan. de 2021. Disponível em: https://www.unigel.com.br/wp-content/uploads/2021/10/FISPQ_AMONIA-INDUSTRIAL_AGROBA_AGROSE_REV00.pdf.

VORMITTAG, E. M. P. A. A.; CIRQUEIRA, S. S. R.; NETO, H. W.; SALDIVA, P. H. N. Análise do monitoramento da qualidade do ar no Brasil. *Estudos Avançados*, v. 35, n. 102, 2021, p. 7-30.

WEATHER SPARK. Clima e condições meteorológicas médias em Araucária no ano todo. Paraná, 2024. Disponível em: https://pt.weatherspark.com/y/29914/Clima-característico-em-Araucária-Paraná-Brasil-durante-o-ano

WYER, K. E.; KELLEGHAN, D. B.; VIDAL V. B.; SCHAUBERGER, G.; CURRAN, T. P. Ammonia emissions from agriculture and their contribution to fine particulate matter: A review of implications for human health . *Journal of Environmental Management*, v. 323, 2022, p. 116285.

YUZBASIOGLU, A. E.; AVSAR, C.; GEZERMAN, A. O. The current situation in the use of ammonia as a sustainable energy source and its industrial potential.*Current Research in Green and Sustainable Chemistry*, v. 5, 2022, 100307.