

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA UNIDADE ACADÊMICA DE ENGENHARIA QUÍMICA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA



DEBORAH ALMEIDA DOS ANJOS

DETERMINAÇÃO DA EXTENSÃO DE ÁREAS CLASSIFICADAS PARA LIBERAÇÕES BIFÁSICAS

CAMPINA GRANDE -PB MARÇO, 2017

DEBORAH ALMEIDA DOS ANJOS

DETERMINAÇÃO DA EXTENSÃO DE ÁREAS CLASSIFICADAS PARA LIBERAÇÕES BIFÁSICAS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, como requisito para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Química.

Orientadores: Antônio Carlos Brandão de Araújo

Heleno Bispo da Silva Junior

Campina Grande –PB Março, 2017

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

A597d Anjos, Deborah Almeida dos. Determinação da extensão de áreas classificadas para liberações bifásicas / Deborah Almeida dos Anjos. – Campina Grande, 2017. 115 f. : il. color.
Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2017. "Orientação: Prof. Dr. Antônio Carlos Brandão de Araújo, Prof. Dr. Heleno Bispo da Silva Junior". Referências.
1. Materiais Inflamáveis. 2. Classificação de áreas – Liberações Bifásicas. 3. Jato Bifásico. I. Araújo, Antônio Carlos Brandão de. II. Silva Junior, Heleno Bispo da. III. Título.

DEBORAH ALMEIDA DOS ANJOS

DETERMINAÇÃO DA EXTENSÃO DE ÁREAS CLASSIFICADAS PARA LIBERAÇÕES BIFÁSICAS

Dissertação aprovada como requisito para a conclusão do curso de Pós Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, pelos seguintes avaliadores:

Avaliado em: 24/03/17

Componentes da banca avaliadora:

Prof. Antônio Carlos Brandão de Araújo UAEQ/CCT/UFCG Orientador

Prof. Heleno Bispo da Silva Júnior UAEQ/CCT/UFCG Orientador

Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves UAEQ/CCT/UFCG Avaliador Interno

Prof. Dr. Antônio Tavernard Pereira Neto UAEQ/CCT/UFCG Avaliador Interno

Prof. Dr. Sidinei Kleber da Silva UAEQ/CCT/UFCG Avaliador Externo

Prof. Dr. And

IFPB Avaliador Externo

Dedico este trabalho à minha família, em especial ao meu irmão Douglas Tadeu.

AGRADECIMENTOS

À minha tia, Francisca Daniel Neta, pelo apoio, dedicação, compreensão, pelo amor, confiança e motivação. Por ser o meu referencial de vida.

Aos meus irmãos, Dário Daniel de Almeida Anjo e Douglas Tadeu de Almeida Ferreira, pelo companheirismo, carinho e pela determinação que me inspiram.

Aos professores e orientadores Dr. Antônio Carlos Brandão de Araújo e Dr. Heleno Bispo da Silva Júnior pelas constantes disponibilidade, atenção, confiança em mim depositada e conhecimentos a mim transmitidos.

Ao professor Dr. José Jailson Nicácio pela assistência em vários momentos, me direcionando na aplicação de determinados conceitos.

Aos demais professores que integram o Laboratório de Experimentação Numérica de Processos (LENP) e que me auxiliaram direta ou indiretamente.

Agradeço ainda aos referidos professores, pela oportunidade de colaboração em um projeto cuja finalidade era voltada ao tema deste trabalho. Esta, contribuiu de maneira significativa para meu desenvolvimento me permitindo adquirir um maior discernimento e consequentemente, uma visão mais crítica dos processos industriais.

Aos amigos e colegas, pelo incentivo e apoio constantes

"O mais competente não discute, domina a sua ciência e cala-se."

Voltaire

RESUMO

Muitos acidentes envolvem lançamentos bifásicos de produtos químicos perigosos para a atmosfera, sendo eles muitas vezes armazenados e transportados na forma de gases liquefeitos sob a sua pressão saturada. Nestes casos, ao entrar em contato com o ambiente, o produto liberado irá se dispersar como um jato de vapor com pequenas gotículas, as quais evaporam provocando alterações na temperatura e composição do gás circundante. As gotículas maiores podem cair sobre o solo (rainout) formando uma poça que irá espalhar-se e evaporar. Gotas menores que um tamanho crítico permanecerão no jato e serão evaporadas devido ao ar arrastado. Nesse sentido, tendo em vista que a estimativa do comportamento do material liberado é necessária para a avaliação do perigo, este trabalho tem como objetivo determinar a extensão da área classificada para liberações bifásicas, utilizando como estudo de caso situações de vazamento com gás liquefeito de butano, em seu estado saturado à temperatura ambiente, e propano armazenado à 321 K e 20,64 bar. Utilizou-se o modelo proposto por Long para jato turbulento subsônico e o modelo para jato bifásico apresentado em Kukkonen para prever esta extensão. A partir da análise dos resultados observou-se para o propano como componente da liberação, um resultado satisfatório quando comparado ao obtido em CFD, apresentando ambos aproximadamente 1,3 m de extensão. A extensão para a situação de vazamento do butano apresentou um valor conservativo (86 m), tendo em vista que o orifício de vazamento possui um diâmetro considerável. Estes resultados são importantes uma vez que podem auxiliar em situações semelhantes na classificação de áreas. Tendo em vista que não há na literatura dados de extensão, este trabalho possui uma inovação prática podendo servir como base para normatização do cálculo de extensão de áreas classificadas para liberações bifásicas.

Palavras-chave: Materiais inflamáveis, classificação de áreas, jato bifásico, extensão.

ABSTRACT

Many accidents involve biphasic release of hazardous chemicals into the atmosphere; they are often stored and transported in the form of liquefied gas under its saturated pressure. In these cases, in the contact with the environment, the released product will disperse as a steam jet with small droplets, which evaporate causing changes in temperature and composition of the surrounding gas. The larger droplets may fall on the ground (rainout) forming a pool that will spread and evaporate. Droplets smaller than a critical size will remain on the jet and will be evaporated due to entrained air. In this case, in view of estimate of the behavior of the released material is useful for a hazard assessment, this work aims to determine the extent of the classified area for biphasic releases, using as case studies liquefied gas leakage of butane, in its Saturated state at ambient temperature, and propane at 321 K and 20,64 bar. Used the model proposed by Long for turbulent subsonic jet and model for two-phase jet in Kukkonen to predict this extension. From the analysis of the results it was observed for propane as a release component, a satisfactory result when compared to the one obtained in CFD, presenting approximately 1.3 m extension. The extent to the leakage situation of the butane presented a conservative value (86 m), considering that the pouring hole has a considerable diameter. These results are important since they may help in similar situations in the classification of areas. In view of the lack of extension data available in the literature, this work has a practical innovation and can serve as a basis for standardization of the calculation of extension of classified areas for biphasic releases.

Keywords: Flammable materials, classification of areas, two-phase jet, extension.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1- Tetraedro do Fogo	19
Figura 2 – Faixa de inflamabilidade	23
Figura 3 - Estágios de uma liberação acidental e processo de dispersão na direção do vento	. 35
Figura 4 - Parâmetros necessários para definir as condições de liberação	36
Figura 5 - Diagrama Pressão-Temperatura para substância pura.	37
Figura 6 - Curva de saturação para uma substância química hipotética	38
Figura 7 - Análise para as condições de liberação de substâncias químicas	39
Figura 8 - Pluma característica formada por um vazamento contínuo de gás flutuante	41
Figura 9 - Fases de dispersão de uma nuvem de gás denso	42
Figura 10 - Dispersão de um jato de gás a alta pressão	44
Figura 11 - Liberação de líquido com formação de poça	45
Figura 12 - Vista esquemática de um vazamento bifásico.	50
Figura 13 - Representação esquemática das regiões do jato bifásico e distribuição das gotas	5.51
Figura 14 - Fluxograma para os modelos de emissão e dispersão	55
Figura 15 - Modelos de dispersão para cada tipo de liberação	57
Figura 16 - Relação entre o número de Reynolds e a área da poça	68
Figura 17 - Esquema de localização da extensão da área classificada	69
Figura 18 - Algoritmo para Tratamento de jato de Líquido sem Flash	70
Figura 19 - Esquema do jato bifásico tratado para os casos de liberação bifásica	71
Figura 20 - Algoritmo para determinação do comportamento e comprimento do jato bifásic	ю.
	80
Figura 21 - Esquema de localização das propriedades do jato bifásico	81
Figura 22 - (a) Diâmetro da gota; (b) Altura da gota; (c) Fluxo líquido mássico	88
Figura 23 - Alcance da gota	89
Figura 24 - Perfil da velocidade horizontal da gota	89
Figura 25 - Perfil de concentração máxima ao longo da área classificada	90
Figura 26 - Perfil de concentração máxima ao longo do jato bifásico	90
Figura 27 - Figura 27 - (a) Diâmetro da gota; (b) Altura da gota; (c) Fluxo líquido mássico.	92
Figura 28 - Alcance da gota	93
Figura 29 - Perfil da velocidade média da gota ao longo da região bifásica	93
Figura 30 - Comparação do alcance da gota obtido pelo modelo utilizado com o CFD	94
Figura 31 - Perfil de concentração do propano ao longo de toda área classificada	94
Figura 32 - Perfil de concentração ao longo da região bifásica	95
Figura 33 - Comparação do perfil de concentração do componente liberado ao longo da áre	a
classificada com o CFD	95
Figura 34 - Regime do fluxo bifásico no modelo TPDIS	111

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 - Tipos de substâncias inflamáveis.	25
Quadro 2- Características de determinação dos cenários de liberação	34

LISTA DE TABELAS

Tabela 1- Limites de inflamabilidade para algumas substâncias.	24
Tabela 2- Classificação das zonas de risco	28
Tabela 3 - Classificação da zona de risco com relação ao grau da fonte de risco	30
Tabela 4 - Valores para o fator de atrito com base na relação comprimento/diâmetro do t	tubo
de saída	63
Tabela 5 - Equações de conservação de massa, momento e energia para fluxo bifásico	65
Tabela 6 - Inputs para liberação de butano	84
Tabela 7 - Inputs para liberação de Propano	85
Tabela 8 - Resultados para liberação de acetona líquida	86
Tabela 9- Resumo dos resultados obtidos para a liberação de butano	87
Tabela 10 – Resumo dos resultados para liberação de propano	91
Tabela 11 - Parãmetros para propriedades utilizadas nas simulações	114
Tabela 12 Parâmetros relevantes da acetona.	114
Tabela 13 - Correlações para determinação das propriedades físicas e termodinâmicas de	os
componentes	115

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Descrição	Unidade
A _e	Área da seção transversal na saída	m²
c _j	Razão molar do componente por ar seco	mol _{ch} .mol _{da} ⁻¹
c_{jL}	Razão molar de água líquida	
C_{ds}	Constante relacionada ao tamanho da gota	-
Cp_w	Calor específico da água	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹
d_0	Diâmetro da gota no nível do chão	m
D	Coeficiente de difusão	m ² .s ⁻¹
g	Aceleração da gravidade	m.s ⁻²
hs	Altura da fonte	m
$H_{\rm V}$	Entalpia específica do vapor	J.kg ⁻¹
k _B	Coeficiente de transferência de massa	$m^2.s^{-1}$
L _{ch}	Calor latente de vaporização do componente químico	J.kg ⁻¹
L_{V}	Calor latente de vaporização	J.kg ⁻¹
Р	Pressão	N.m ⁻²
Pa	Pressão ambiente	N.m ⁻²
Pr	Número de Prandt	-
Pv^0	Pressão de vapor do produto químico liberado	N.m ⁻²
$P_{V,W}^{0}$	Pressão de vapor da água	N.m ⁻²
qs	Taxa de fluxo do fluido	kg.s ⁻¹
R	Constante dos gases ideais	J.mol ⁻¹ .K ⁻¹
Re	Número de Reynolds	-
Sc	Número de Schmidt	-
Т	Temperatura	K
T_a	Temperatura ambiente	K
T_B	Temperatura de bolha	K
T_j	Temperatura do jato	K
u	Velocidade do fluido	$m.s^{-1}$
We	Número de Weber	We

LISTA DE SÍMBOLOS GREGOS

Símbolo	Descrição	<u>Unidade</u>
μ_{a}	Peso molecular do ar	kg.mol ⁻¹
μ_{ch}	Peso molecular do componente químico	kg.mol ⁻¹
μ_{jd}	Peso molecular da mistura de vapores	kg.mol ⁻¹
$\mu_{ m w}$	Peso molecular da água	kg.mol ⁻¹
ρ	Densidade média do fluido	kg.m ⁻³
$ ho_{a}$	Densidade ambiente	kg.m ⁻³
$ ho_L$	Densidade do líquido	kg.m ⁻³
ρ_V	Densidade do vapor	kg.m ⁻³
v_a	Viscosidade cinemática do ar	$m^{2}.s^{-1}$
$\Phi_{ m m}$	Qualidade (fração mássica de vapor)	kg.kg ⁻¹

1. INTRODUÇÃO	
1.1 ESCOPO DO TRABALHO	
1.2 JUSTIFICATIVA	
	15
	13
1.3.1 Objetivos Gerais	
1.3.2 Objetivos Específicos	16
1.4 Contribuições Esperadas	16
1.5 Organização do Trabalho	16
2. A CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS	
2.1 PROPRIEDADES E CONCEITOS GERAIS	
2.1.2 O Tetraedro Do Fogo	
2.1.3 Temperatura de Ignição	
2.1.4 Ponto de Fulgor	
2.1.5 Ponto de Combustão	
2.1.6 Densidade	
2.1.7 Pressão de Vapor	
2.1.8 Limites de Inflamabilidade	
2.1.8.1 Limite Inferior de Inflamabilidade	
2.1.8.2 Limite Superior de Inflamabilidade	
2.2 Atmosferas Explosivas	24
2.3 Classificação de Áreas	27
2.3.1 Zonas	
2.3.2 Fontes de Risco	
3. LIBERAÇÕES ACIDENTAIS	
3.1 Cenários de Liberação	
3.2 TIPOS DE LIBERAÇÃO	
3.2.1 Liberação de Gás	
3.2.1.1 Gás Flutuante	41
3.2.1.2 Gás com Flutuabilidade Neutra	
3.2.2 Descrição Geral de Uma Emissão Gasosa	
3.2.3 Liberação de Líquido	
3.2.3.1 Poças de Líquidos em Ebulição	
3.2.3.2 Evaporação de Líquidos Voláteis	
3.2.3.3 Evaporação de Líquidos Relativamente Não -Voláteis	
3.2.3 Liberação Bifásica	
3.2.3.1 Liberação de Gás Liquefeito	
3.2.3.1.1 <u>Expansão e Flasheamento</u>	51
3.2.3.1.2 Evaporação e Arrastamento	
4. MODELOS DE EMISSÃO E DISPERSÃO	54
4.1 Estimativas da Taxa de Emissão	57

SUMÁRIO

4.1.1 Taxa de Emissão para Gases	58
4.1.2 Taxa de Emissão para Líquidos	60
4.1.3 Taxa de Emissão para Liberações Bifásicas	61
4.2 MODELO DE EQUILÍBRIO HOMOGÊNEO (HEM)	64
5. MODELAGEM	66
5.1 PROPRIEDADES FÍSICAS E TERMODINÂMICAS	66
5.2 MODELAGEM DE LIBERAÇÃO DE LÍQUIDO SEM <i>Flash</i>	67
5.3 MODELAGEM PARA LIBERAÇÃO BIFÁSICA	70
5.3.1 Jato Bifásico	70
5.3.2 Estimativa da Pressão e Temperatura na saída	71
5.3.3 Modelagem do Jato Bifásico	72
5.3.3.1 Cálculo das condições no jato depois do flash – Etapa 1	73
5.3.3.2 Cálculo do diâmetro das gotas depois do flash – Etapa 2	74
5.3.3.3 Evaporação das gotas e ocorrência de rainout – Etapa 3	75
5.3.3.4 Cálculo das condições no jato após a evaporação de todas as gotículas	– Etapa 4 77
5.4 DETERMINAÇÃO DO COMPRIMENTO DO JATO BIFÁSICO	
5.5 DETERMINAÇÃO DA VELOCIDADE E CONCENTRAÇÃO DO JATO	
5.6 EXTENSÃO DA NUVEM DE VAPOR	
5.7 Cenários de Vazamento/Liberação	83
5.7.2.1 Vazamento de Butano	
5.7.2.2 Vazamento de Propano	
6. RESULTADOS E DISCUSSÃO	86
6. RESULTADOS E DISCUSSÃO 6.1 Resultados para Liberação de Acetona	86
 6. RESULTADOS E DISCUSSÃO 6.1 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE ACETONA	86 86 87
 6. RESULTADOS E DISCUSSÃO 6.1 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE ACETONA	86 86 87 90
 6. RESULTADOS E DISCUSSÃO 6.1 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE ACETONA 6.2 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE BUTANO 6.2.1 Extensão da Área Classificada 6.3 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE PROPANO 	86
 6. RESULTADOS E DISCUSSÃO 6.1 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE ACETONA 6.2 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE BUTANO 6.2.1 Extensão da Área Classificada 6.3 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE PROPANO 6.3.1 Extensão da Área Classificada 	86
 6. RESULTADOS E DISCUSSÃO 6.1 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE ACETONA 6.2 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE BUTANO 6.2.1 Extensão da Área Classificada 6.3 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE PROPANO 6.3.1 Extensão da Área Classificada 7. CONSIDERAÇÕES FINAIS. 	
 6. RESULTADOS E DISCUSSÃO 6.1 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE ACETONA 6.2 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE BUTANO 6.2.1 Extensão da Área Classificada 6.3 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE PROPANO 6.3.1 Extensão da Área Classificada 7. CONSIDERAÇÕES FINAIS 7.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS 	86
 6. RESULTADOS E DISCUSSÃO 6.1 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE ACETONA 6.2 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE BUTANO 6.2.1 Extensão da Área Classificada 6.3 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE PROPANO 6.3.1 Extensão da Área Classificada 7. CONSIDERAÇÕES FINAIS 7.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 	
 6. RESULTADOS E DISCUSSÃO 6.1 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE ACETONA 6.2 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE BUTANO 6.2.1 Extensão da Área Classificada 6.3 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE PROPANO 6.3.1 Extensão da Área Classificada 7. CONSIDERAÇÕES FINAIS 7.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS APÊNDICE – PROPRIEDADES E TERMODINÂMICA DO JATO 	
 6. RESULTADOS E DISCUSSÃO	
 6. RESULTADOS E DISCUSSÃO 6.1 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE ACETONA 6.2 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE BUTANO 6.2.1 Extensão da Área Classificada 6.3 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE PROPANO 6.3.1 Extensão da Área Classificada 7. CONSIDERAÇÕES FINAIS 7.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS APÊNDICE – PROPRIEDADES E TERMODINÂMICA DO JATO ANEXO A –VARIAÇÃO DE ENTALPIA E ESTADO DE REFERÊNCIA ANEXO B– FLUXO BIFÁSICO ATRAVÉS DE TUBOS. 	
 6. RESULTADOS E DISCUSSÃO 6.1 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE ACETONA 6.2 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE BUTANO 6.2.1 Extensão da Área Classificada 6.3 RESULTADOS PARA LIBERAÇÃO DE PROPANO 6.3.1 Extensão da Área Classificada 7. CONSIDERAÇÕES FINAIS 7.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS APÊNDICE – PROPRIEDADES E TERMODINÂMICA DO JATO ANEXO A –VARIAÇÃO DE ENTALPIA E ESTADO DE REFERÊNCIA ANEXO B– FLUXO BIFÁSICO ATRAVÉS DE TUBOS ANEXO C– PROPRIEDADES E PARÂMETROS. 	

CAPÍTULO 1

1. INTRODUÇÃO

1.1 Escopo do Trabalho

Com o desenvolvimento econômico e o crescimento populacional, as demandas e consequentemente o número de indústrias e as escalas de produção vêm aumentando. Os processos se tornam mais robustos e complexos e novas matérias-primas passam a ser utilizadas. Neste cenário, a exigência de medidas que garantam a segurança da unidade, dos equipamentos e acima de tudo das pessoas envolvidas, torna-se cada vez maior. Um acidente pode ter consequências catastróficas, causando mortes e prejuízos financeiros expressivos que e em muitos casos se mostram irreversíveis (CRUZ, 2012).

Estes acidentes podem afetar as pessoas, os bens e o ambiente. As consequências humanas podem ser físicas (fatalidades ou ferimentos) ou psicológicas, e pode afetar tanto os funcionários do estabelecimento em que o acidente ocorre quanto a população externa. As consequências sobre a propriedade são geralmente a destruição de equipamentos ou edifícios. Já as consequências ambientais podem ser imediatas ou tardias, e incluem o lançamento de um material perigoso na atmosfera, no solo ou na água. Além disso, grandes acidentes geralmente causam prejuízos indiretos, tais como perda de lucros a empresa envolvida (CASAL, 2008).

Desde o início da utilização da eletricidade pelas indústrias, no final do século XIX, equipamentos elétricos foram instalados em ambientes com presença de substâncias inflamáveis. Ainda nessa época, segundo Obe e Mclean (1999), surgiram os primeiros debates sobre o potencial dos equipamentos elétricos em se tornarem fontes de ignição de atmosferas explosivas. Percebeu-se que as máquinas elétricas, tão necessárias para a indústria emergente, também poderiam provocar explosões dentro de uma área industrial.

O processo industrial frequentemente envolve o uso, processamento ou armazenamento de materiais perigosos (inflamáveis). Evidentemente as plantas industriais associadas com estas operações necessitam ser dispostas e controladas de modo que estes materiais não se inflamem ou causem explosão. Deste modo, pode ocorrer em determinados locais a mistura de gases, vapores, poeiras, fibras inflamáveis, que associadas com o ar, em proporções adequadas, formam a atmosfera explosiva (GARSIDE, 1995; ERTHAL, 2004).

A etapa inicial nesta situação compreende a avaliação do grau de risco no local. Isto é obtido através de um mapa do ambiente industrial que mostre a probabilidade de ocorrência de uma mistura explosiva nesse ambiente e em que extensão (volume de risco) essa mistura poderá acontecer. Entende-se por extensão da área classificada os limites da área de risco de presença de mistura inflamável na instalação. A magnitude desta extensão depende de diversos fatores relacionados não só com a substância inflamável em questão, mas também com fatores externos, tais como: condições de ventilação, porte e tipo do equipamento de processo, etc. A influência de cada um desses fatores irá determinar os limites de classificação de áreas (JORDÃO e FRANCO, 2002; NETO, 2010).

A propensão de energia elétrica para criar faíscas ou superfícies quentes apresenta uma possibilidade de que as atmosferas explosivas podem ser inflamadas resultando em incêndio ou explosão. Sendo assim, é necessário o desenvolvimento de novas operações a um grau em que essas explosões sejam tão raras que o risco é largamente compensado pelos benefícios dos processos em que pode ocorrer (MCMILLAN, 2000).

As consequências de uma liberação acidental dependerão, por um lado, das condições iniciais de armazenamento e também no ambiente. Isso ocorre porque a presença de obstáculos de tamanho suficiente pode afetar o jato e alterar as características da nuvem perigosa (BONNET e LACOME, 2006).

No nível de ruptura, no caso de uma liberação acidental de gás liquefeito pressurizado, o produto liberado no ar ambiente é subitamente colocado sob condições de temperatura e pressão que são tais que uma parte do líquido vaporiza violentamente. Este fenômeno é geralmente chamado de "*flash*". A vaporização súbita de uma parte do líquido leva à fragmentação do jato de líquido em gotas finas cujo diâmetro e velocidade dependem especialmente da diferença entre a temperatura da substância inicial e o seu ponto de ebulição. Uma fragmentação mecânica também pode ser observada quando o esforço de cisalhamento devido a turbulências de fricção quebrar a fase líquida, apesar das forças de tensão superficial (BIGOT et al., 2004).

De acordo com Duplantier e Couillet (2003), na ausência de qualquer obstáculo, após um comprimento de algumas vezes o diâmetro da ruptura, um jato bifásico se desenvolve. Este jato é constituído por gotículas em suspensão numa mistura de gás e ar ambiente que é arrastado ao longo do mesmo. A dispersão atmosférica deste jato bifásico é particularmente dependente do ambiente. Nos casos em que não existem obstáculos ao longo do percurso, as diferentes contribuições para a formação de uma nuvem inflamável ou tóxica são:

- A quantidade de produto susceptível de ser vaporizada quase instantaneamente e a distribuição do tamanho das gotículas resultantes do fenômeno de *flash* que ocorre ao nível da violação;
- A quantidade de produto susceptível de formar uma poça no solo (vulgarmente chamada de chuva) que depois se evapora para a atmosfera devido aos fenômenos de transferência de massa e calor;
- A quantidade de produto susceptível de ser arrastada para o ar sob a forma de aerossol.

Neste caso, a estimativa da quantidade de vapor liberado no ar consiste em estudar a evaporação das gotículas formadas e a formação, e depois a evaporação, de uma poça de líquido no nível do solo. Esta estimativa é importante para definir um termo de origem realista que será usado em um modelo de dispersão atmosférica.

1.2 Justificativa

Alguns acidentes são causados por falhas catastróficas, cuja possibilidade de ocorrência é remota. Porém, a ocorrência de pequenos vazamentos durante a operação normal de uma unidade é mais comum e pode se tornar precursora de incidentes de elevadas proporções caso entrem em contato com uma fonte de ignição, como, por exemplo, equipamentos elétricos (CRUZ, 2012).

Nesse contexto, verifica-se a necessidade de definir a área onde será necessária a aplicação de equipamentos elétricos especiais. Sendo assim, tendo em vista que a classificação de áreas é um processo fundamental para evitar incêndios e/ou explosões em ambientes com geração e existência de atmosferas explosivas, este trabalho visa contribuir com o desenvolvimento de melhorias relacionadas ao processo de dispersão em liberações bifásicas, uma vez que estas muitas vezes representam maior ameaça devido a grande massa de ar carregada de gotículas de aerossol que podem formar.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivos Gerais

Este trabalho trata o processo de liberações acidentais com e sem a ocorrência de *flash*, possuindo como principal finalidade a determinação da extensão de áreas classificadas em liberações acidentais bifásicas com formação de *spray*.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Determinação da extensão devido à liberação de líquido que não flasheia;
- Avaliação do ponto de evaporação das gotas para os casos de liberações bifásicas;
- Determinação do perfil de concentração em toda a extensão da área classificada.

1.4 Contribuições Esperadas

O trabalho irá contribuir no que tange a classificação de áreas, com o incremento de melhorias no modelo adotado de maneira que este possa oferecer uma maior confiabilidade nos resultados.

1.5 Organização do Trabalho

Este estudo está dividido em sete capítulos, a partir desta introdução (Capítulo 1), cujos conteúdos são descritos a seguir:

- <u>Capítulo 2</u>: Neste capítulo são definidas algumas propriedades de substâncias que podem influenciar na classificação de áreas e abordados conceitos gerais cuja compreensão é necessária para o entendimento dos riscos inerentes às liberações acidentais;
- <u>Capítulo 3</u>: Este, abrange de forma breve os cenários de liberação e define os possíveis tipos de liberação (gás, líquido, bifásico) prováveis de ocorrer nos processos industriais que envolvem armazenamento e transporte de substâncias inflamáveis;
- <u>Capitulo 4</u>: Este capítulo apresenta uma breve abordagem sobre os modelos de origem, utilizados para descrever como os materiais são liberados no processo, e algumas correlações que podem ser usadas para calcular as taxas de emissão. Estas, são descritas para liberação de jatos de gás, líquidos e fluxo bifásico;
- <u>Capítulo 5</u>: Aqui toda a metodologia utilizada é descrita e os cenários utilizados para validação (liberação de acetona líquida sub-resfriada e liberações bifásicas de butano e propano), são detalhados;

- <u>Capítulo 6</u>: Este capítulo apresenta uma análise dos resultados obtidos;
- <u>Capítulo 7</u>: Oferece uma conclusão geral com base nos resultados e apresenta sugestões de estudos futuros acerca deste tema.

CAPÍTULO 2

2. A CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS

2.1 Propriedades e Conceitos Gerais

2.1.2 O Tetraedro Do Fogo

De acordo com Chu (2014), o fogo é uma reação exotérmica de oxidação, ocasionando uma combustão rápida com emissão de luz, calor e chama. O fogo pode ser conceituado ainda, como um processo (reação química) de oxidação rápida, autossustentável, acompanhada pela produção de luz e calor em intensidades variáveis, que segundo Cruz (2012), se inicia e se mantém a partir da combinação de quatro elementos que compõem o tetraedro do fogo (Figura 1).

- a) Calor: é o elemento que serve para dar início e manter a combustão, é proveniente de uma fonte de ignição (energia de ativação);
- b) Combustível: é o elemento suscetível de entrar em combustão, que serve de propagação do fogo, tendo suas ligações carbono-carbono rompidas para a formação de dióxido de carbono (substância inflamável);
- c) Comburente: é o elemento que se associa quimicamente ao combustível fazendo-o entrar em combustão. O mais comum é o oxigênio;
- d) Reação em Cadeia: é o fator que torna o fogo autossustentável. O calor proveniente da combustão alcança o combustível que se combina com o comburente, gerando mais fogo que novamente alcança o combustível, formando um ciclo constante.

Costa (2016) explica que a combustão é iniciada a partir da presença de calor, combustível e comburente e uma vez iniciada, os gases envolvidos formam uma reação em cadeia transmitindo calor para outras partículas do combustível, desta forma alimentando o fogo. Para ocorrer continuidade da combustão é necessária a reação em cadeia.





Com relação ao combustível, algumas propriedades interferem na ocorrência de uma combustão, influenciando nos critérios de grau de risco e classificação de áreas. Tais propriedades, necessárias para uma melhor compreensão do tema, são listadas abaixo e definidas nos próximos subtópicos.

- a) Temperatura de ignição;
- b) Ponto de fulgor;
- c) Ponto de combustão;
- d) Densidade;
- e) Pressão de vapor;
- f) Limites de inflamabilidade.

2.1.3 Temperatura de Ignição

A temperatura de ignição de uma substância é compreendida como a temperatura mínima de uma superfície aquecida na qual, sob condições especificadas, pode ocorrer a ignição de uma substância inflamável na forma de uma mistura de gás ou vapor com ar. Esta propriedade é dependente de uma série de fatores, tais como (COSTA, 2016; CRUZ, 2012; SILVA, 2009):

- a) Composição da mistura inflamável (combustível-ar);
- b) Dimensões do local onde ocorrerá a ignição;
- c) Tempo de duração do aquecimento;
- d) Características da fonte de ignição.

2.1.4 Ponto de Fulgor

O fato de haver uma mistura de vapor e ar na superfície do líquido combustível por si só não significa que esta mistura seja inflamável. Para que se crie uma mistura explosiva, é necessário que a temperatura ambiente esteja suficientemente alta. Assim, é formada uma quantidade apreciável de vapor por evaporação, capaz de formar uma mistura inflamável acima da superfície do líquido.

Nesse contexto, o ponto de fulgor é a menor temperatura na qual um líquido sob certas condições normalizadas libera vapores em quantidade suficiente para formar uma mistura vapor/ar inflamável. Nessa temperatura, a quantidade de vapores não é suficiente para assegurar uma combustão contínua e sim de uma forma rápida chamada de "*flash*" que se extingue uma vez que a temperatura na superfície do líquido ainda não é suficientemente elevada (CRUZ, 2012; JORDÃO, 2002; NETO, 2010).

O ponto de fulgor das substâncias inflamáveis pode ser alterado pela adição de outras substâncias. Se a adição for feita com líquidos inflamáveis com ponto de fulgor superior, a mistura terá um ponto de fulgor maior que a da substancia original. Em caso contrário, o ponto de fulgor será reduzido (NETO, 2010).

2.1.5 Ponto de Combustão

É a temperatura mínima necessária para que um combustível desprenda vapores ou gases inflamáveis que, combinados com o oxigênio do ar e ao entrar em contato com uma chama, se inflamam, e, mesmo que se retire a chama, o fogo não se apaga, pois essa temperatura faz gerar, do combustível, vapores ou gases suficientes para manter o fogo ou a transformação em cadeia.

2.1.6 Densidade

No processo de classificação de áreas é de suma importância saber se o gás ou vapor inflamável, quando liberado para o meio externo, dirige-se para baixo ou para cima, uma vez que a região de risco estará situada nas partes inferiores ou superiores, dependendo da densidade da substância inflamável. Este fator influencia na determinação da extensão e o comportamento de uma nuvem explosiva.

Nos casos em que o vapor combustível possui densidade mais elevada que a do ar (densidade relativa maior que 1,0) este vapor tende a se acumular nas partes inferiores do local onde a nuvem se forma, e assim, o risco de explosão é maior próximo ao chão. Naturalmente, vapores mais leves que o ar (densidade relativa menor que 1,0) não se acumulam nas regiões mais baixas, e, portanto, a nuvem explosiva ocupa as partes superiores, o que ocasiona menor probabilidade de explosão, em casos de locais abertos e livres.

2.1.7 Pressão de Vapor

Para que um líquido inflamável mude do estado líquido para o gasoso e forme uma atmosfera explosiva é preciso ocorrer a mudança de estado, através do processo físico de evaporação e vaporização. Já o coeficiente de evaporação vai indicar o tempo necessário um líquido leva para evaporar completamente.

Segundo Jordão (2002), a pressão e vapor é o esforço das moléculas de um líquido para ganhar o espaço acima da sua superfície, sendo aumentada pela temperatura e vaporizando o líquido quando atinge a pressão atmosférica. De acordo com a IEC 60079-10-1, como cada substância inflamável possui uma pressão de vapor, que está ligada diretamente a temperatura, as condições do ambiente em que ela se encontra são agravantes para alterar suas características e aumentar o risco de explosão. Então a pressão e temperatura do processo em que o produto está armazenado devem garantir a segurança para não elevar a pressão de vapor da substância.

2.1.8 Limites de Inflamabilidade

Em uma mistura de gases, assim como aquelas que compõem os gases aquecidos dos incêndios, existe uma série de moléculas diferentes entre si submetidas a ação direta do calor. Este calor, como forma primária de energia, transfere movimento a estas moléculas, além daquele que elas já possuem. Neste estado, as moléculas de gás mais leve se movem com maior

rapidez que as mais pesadas, gerando uma série de choques entre elas, o que faz com que a energia interna do gás aumente. À medida que esse calor aumenta, as moléculas incrementam seu movimento aumentando paulatinamente o número de choques entre elas e, por conseguinte, seu nível energético. O progresso desta situação nos conduz a um estágio no qual a energia acumulada pelo gás é superior à energia que mantém coesas as moléculas e estas acabam por se romper em função do efeito dos choques repetidos, ou seja, elas se desintegram (OLIVEIRA, 2005).

Se existe suficiente aporte de ar atmosférico com adequadas concentrações de oxigênio, o combustível (agente redutor) ativado junto com o oxigênio (agente oxidante) se inflamará. Pode-se dizer que a inflamabilidade de um gás é uma consequência mecânica favorecida por uma fonte de energia que é o calor, mas podem existir outras fontes de origem distintas como ondas de choque, ou ainda, a combinação de ondas de choque e calor.

De acordo com a NBR 17.505-1, limite de inflamabilidade é a faixa de concentração de um gás ou vapor, em que pode ocorrer combustão ou explosão na presença de uma fonte de ignição. O valor de limite de explosividade é expresso como percentual de gás ou vapor no ar e a faixa de concentração encontra-se entre o Limite Inferior de Inflamabilidade (LII) e o Limite Superior de Inflamabilidade (LSI) (AMARAL, 2015).

2.1.8.1 Limite Inferior de Inflamabilidade

A desintegração das moléculas não é suficiente para que a inflamação se produza. Fazse necessário que o número de moléculas que se desintegram sejam suficientes para que, junto com o oxigênio do ar atmosférico, se inicie uma reação de combustão. O número mínimo de moléculas de combustível necessárias para que se produza a ignição constitui a mínima concentração de gases do incêndio necessárias para que este se inflame em uma reação química de combustão com o oxigênio. O valor desta concentração com respeito ao volume total dos gases em um determinado ambiente é denominado de limite inferior de inflamabilidade (LII). Essa relação é expressa e medida em percentagem de volume de combustível no ar (OLIVEIRA, 2005).

De acordo com a norma da ABNT NBR IEC 60079-10-1 (2009), o limite inferior de inflamabilidade é a concentração de gás ou vapor inflamável no ar, abaixo da qual a atmosfera de gás não é explosiva e a mistura é considerada pobre, não permitindo a combustão ou explosão. Para um dado volume liberado, quanto menor o LIE, maior é a extensão da zona.

2.1.8.2 Limite Superior de Inflamabilidade

Com a elevação da concentração a níveis ainda maiores, é atingido um ponto em que a mistura possui uma fração de vapores inflamáveis muito grande, e a fração de oxigênio na mistura é baixa demais para que ocorra a ignição. A concentração de vapores inflamáveis a partir da qual não ocorre mais a ignição devido a quantidade insuficiente de oxigênio é dita limite superior de inflamabilidade (LSI) (CRUZ, 2012).

De acordo com a NBR IEC 60079-10-1 (2009), o limite superior de inflamabilidade é a concentração de gás ou vapor inflamável no ar, acima da qual a atmosfera de gás não explosiva. Acima deste limite a mistura é considerada muito rica, não permitindo a combustão ou explosão.

Quando a concentração de uma substância inflamável estiver dispersa no ar, na forma de gás ou vapor, em quantidade suficiente entre o valor mínimo (LII) e o valor máximo (LSI), ou seja, uma mistura "ideal", e houver uma fonte de ignição, ocorrerá a explosão. Estes limites se alteram em condições de pressão e temperatura. A Figura 2 apresenta um esquema apontando, de uma forma geral, a faixa de inflamabilidade na qual uma explosão pode ocorrer (CICERO, 2014).





As substâncias que possuem faixas de inflamabilidade amplas apresentam maior risco quando comparadas com outras que possuem faixas de inflamabilidade menores, pois, no caso de liberação para a atmosfera, o tempo de permanência com mistura inflamável será tanto maior

Fonte: Adaptado de Avaliação e Controle dos Riscos Atmosféricos nos Espaços Confinados, disponível em: < <u>https://pt.slideshare.net/audemaro/2nr-33-deteco-de-gases-e-ventilao</u>>.

quanto maior for a faixa de inflamabilidade da substância, considerando-se as mesmas condições de liberação em ambos os casos. A Tabela 1 apresenta limites de inflamabilidade para algumas substâncias (JORDÃO e FRANCO, 2002).

Các ou vonor	Limites em ar (%)	
Gas ou vapor	Inferior	Superior
Hidrogênio	4,0	75,0
Amônia	15,0	28,0
Metano	5,3	14,0
Etano	3,0	12,5
Propano	2,2	9,5
Butano	1,9	8,5
Benzeno	1,4	7,1
Gasolina	1,4	7,6

Tabela 1- Limites de inflamabilidade para algumas substâncias.

Fonte: Coward e Jones (1952).

A utilização dos limites de inflamabilidade, sendo o LFL normalmente mais importante uma vez que determina a extensão da atmosfera explosiva, é fundamental para determinar as condições nas quais uma chama ou explosão podem ocorrer, além de permitir o uso de componentes químicos em uma concentração abaixo do seu LFL, contribuindo com a segurança na operação de materiais inflamáveis.

2.2 Atmosferas Explosivas

Os riscos de explosão existem em qualquer empresa em que subprodutos inflamáveis são manipulados. Estes incluem muitas matérias-primas, produtos intermediários, produtos acabados e resíduos do processo. Sendo assim, o risco de formação de uma atmosfera explosiva existe nos processos e procedimentos de trabalho mais diversificados, o que afeta quase todos os ramos da atividade (IBARS e TORRENT, 2005).

Para que uma explosão ocorra deve existir uma atmosfera explosiva e uma fonte de ignição. Isto requer a existência de uma substância combustível (gás, vapor, ou pó) num

determinado intervalo de concentração, e um oxidante (ar), e ainda a presença de uma fonte de energia capaz de se iniciar a reação de combustão.

Atmosferas inflamáveis podem ser formadas onde líquidos inflamáveis são manuseados abaixo do seu ponto de fulgor, na forma de neblina ou pulverizado, segundo o IP (Institute of Petroleum)-parte 15 (2002). Certos líquidos deverão ser tratados como inflamáveis, normalmente definidos como não perigosos, quando eles são bombeados ou estão sob pressão, sendo capazes de produzir neblina ou ser pulverizados como, por exemplo, na possibilidade de vazamento através de um pequeno orifício, de uma tubulação ou de uma falha de flange. Neste caso, eles devem ser tratados como um líquido perigoso, gerando uma área classificada adequada ao risco. Já para a norma Petrobras N-2166 (1999), as substâncias inflamáveis incluem os gases, os líquidos altamente voláteis (LAV) e os vapores de líquidos inflamáveis ou combustíveis. O Quadro 1 mostra alguns exemplos de substâncias inflamáveis.

Substância Inflamável	Exemplos	Descrição
Gases	Hidrogênio	Muitas vezes, compostos de hidrogênio e carbono que exigem muito pouco para reagir com o oxigênio atmosférico.
Líquidos/ vapores	Hidrocarbonetos	À temperatura ambiente, quantidades suficientes desses hidrocarbonetos podem evaporar para formar uma atmosfera potencialmente explosiva na sua superfície.
Sólidos	Poeiras e fibras	 A natureza cumulativa do risco de poeira é a diferença mais significativa entre um risco de gás / vapor e o risco de poeira; Uma nuvem de poeira se instalará em superfícies próximas, se não for acesa. A menos que removidas, as camadas de poeira podem acumular-se e servirão como o combustível para a ignição subsequente; A típica explosão de poeira começa com a ignição de uma pequena nuvem de poeira, resultando em danos relativamente pequenos; As ondas de pressão da pequena explosão inicial são a parte mais prejudicial das explosões de poeira das superfícies verticais ou horizontais circundantes para produzir uma nuvem maior que é inflamada pelas partículas ardentes da nuvem inicial. Desta forma, a pequena explosão inicial pode produzir uma explosão muito maior. Em alguns casos ocorre uma série de explosões, cada uma mais forte do que a anterior.

Quadro 1- Tipos de substâncias inflamáveis.

Silva (2009) aponta que é necessário observar as várias formas de operação de cada uma das partes do processo e das suas instalações, na avaliação dos riscos de formação de atmosfera explosiva. Dentre elas pode-se citar:

- Condições de funcionamento normais, incluindo trabalhos de manutenção;
- Mau funcionamento e falhas previsíveis;
- Má utilização, razoavelmente previsível.

Uma área na qual uma atmosfera explosiva está presente ou uma alta probabilidade de ocorrência em quantidades que requeiram especial precaução para a construção, instalação e uso de equipamentos, é entendida como área classificada. Em situações em que pode haver uma atmosfera de gás explosivo, devem ser tomadas as seguintes medidas (BAHADORI, 2013):

- Uso de aparelhagem elétrica com uma probabilidade extremamente baixa de criar uma fonte de ignição;
- Eliminar a probabilidade de uma atmosfera explosiva ocorrer em torno de uma fonte de ignição ou eliminar a fonte de ignição;
- Limitar a zona afetada pelas chamas e pressões de explosão a um nível de segurança suficiente;
- Prevenção do centelhamento e formação de superfícies quentes;
- Confinamento das explosões.

Quando tais não forem possíveis, medidas de proteção, equipamentos de processos, sistemas e procedimentos devem ser escolhidos de modo que probabilidade de ambos estarem presentes ao mesmo tempo é aceitavelmente pequena. No primeiro caso é preferível eliminar a presença da atmosfera explosiva, e isso é possível por:

- Substituição com uma substância não inflamável ou aumentar o *flash point* acima da temperatura do processo (por exemplo, adicionando água);
- Redução da temperatura do processo (por exemplo, arrefecimento);
- Limitando a concentração abaixo do LEL (por exemplo, diluição / ventilação ou inertização);
- Design à prova de explosão (contenção).

2.3 Classificação de Áreas

Segundo Schram (1993), áreas classificadas podem ser definidas como locais, áreas ou espaços onde existe o perigo (ou a possibilidade) de fogo ou explosão devido à presença de gases ou vapores, líquidos, poeiras combustíveis ou fibras inflamáveis em suspensão. Para Bahadori (2013), a classificação de área é um método de analisar e classificar o meio ambiente onde a atmosfera de gás explosivo pode ocorrer. Desta maneira, a partir do resultado da classificação de área, é possível estabelecer os requisitos construtivos dos equipamentos elétricos, comumente denominados de *Equipament Protection Level* (EPL), que estarão dentro dessa região, tornando-os aptos para operar nessa circunstância.

A classificação baseia-se no grau de periculosidade da substância combustível manipulada e na frequência de formação da atmosfera potencialmente explosiva. Visando a padronização dos procedimentos de classificação das áreas de risco, cada País adota as recomendações de Normas Técnicas. No Brasil a ABNT (Associação Brasileira de Normas Técnicas) utiliza a coletânea de Normas Técnicas da IEC (International Electrical Commicion), que trata da classificação de áreas no volume IEC-79-10.

Os estudos de classificação de áreas têm por finalidade básica mapear e determinar as extensões e as abrangências das áreas que podem conter misturas explosivas e, consequentemente, permitir a posterior especificação adequada de equipamentos e sistemas para cada tipo de área classificada mapeada por estes estudos. A partir destes estudos de classificação de áreas, deve ser assegurado que a especificação e a instalação dos equipamentos atendam aos requisitos de risco da área, em conformidade com os requisitos das respectivas normas técnicas aplicáveis da ABNT NBR IEC. Sendo assim, o projeto, operação ou locação dos equipamentos de processo deve assegurar que, mesmo quando operando anormalmente, a quantidade de material inflamável ou combustível liberado seja minimizada, de modo a reduzir a extensão da área classificada (BULGARELLI, 2009).

De acordo com Jordão (2002), a realização da classificação de áreas exige uma maior atenção para as seguintes informações:

- Propriedades físicas e químicas do tipo de substância presente no local, quando submetida a um processo de combustão;
- Probabilidade da substância inflamável se encontrar no meio externo;
- Limites da área com risco de presença de uma mistura explosiva.

Instalações em que materiais inflamáveis são fabricados, manipulados ou armazenados devem ser utilizadas e mantidas de modo que todas as liberações de materiais inflamáveis e a extensão das áreas perigosas sejam mínimas. Dessa forma, em atividades para as quais o local de suas realizações possa ser considerado como sendo uma área classificada, a primeira providência a ser tomada será a análise da probabilidade de existir o surgimento de atmosferas explosivas neste local. Para isto, as normas técnicas recomendam que sejam definidas as chamadas zonas de risco.

2.3.1 Zonas

Como base para determinar a extensão das medidas de proteção, as áreas perigosas subsistentes devem ser classificadas em termos de zonas de acordo com a probabilidade de ocorrência de misturas inflamáveis em tais ambientes. As áreas com possibilidades ou presença de gases e vapores são classificadas em zonas perigosas definidas em 0, 1 e 2, já as áreas com possibilidades ou presença de poeira combustível são classificadas em zonas perigosas 20, 21 e 22, conforme a Tabela 2.

Material presente	Zona	Definição		
	0	Área na qual uma atmosfera gasosa explosiva está presente continuamente, ou está presente por longos períodos.		
Gases e vapores	1	Área na qual uma atmosfera gasosa explosiva tem probabilidade de ocorrer em operação normal.		
	2	Área na qual uma atmosfera gasosa explosiva não é provável ocorrer em operação normal, porém se ocorrer, será por um período curto.		
	Local onde a atmosfera explosiva, em forma de nuvem de poeira, está presente continuamente, por longos períodos de tempo em quantidade suficiente para oferecerem risco de formação de atmosfera explosiva.			
Poeiras e fibras	21	Local onde as poeiras ou fibras combustíveis são prováveis de ocorrer ocasionalmente, em condições normais de operação, em quantidade suficiente para oferecerem risco de formação de atmosfera explosiva.		
	22	Local onde a atmosfera explosiva, em forma de nuvem de poeira, existirá somente em condições anormais de operação e, se existir, será somente por curto período de tempo.		

Tabela 2- Classificação das zonas de risco.

2.3.2 Fontes de Risco

Segundo a norma ABNT NBR 60079-10, o elemento básico para se definirem as áreas classificadas consiste na identificação das fontes de risco e na determinação do seu grau de periculosidade. A fonte de risco configura-se como o local onde um vapor ou líquido inflamável pode ser liberado e formar atmosfera inflamável e/ou explosiva, dessa forma cada equipamento do processo (tanques, bombas, tubulações) deve ser considerado uma fonte potencial de risco de liberação de gás inflamável. Equipamentos que não liberam materiais inflamáveis e equipamentos que contenham material inflamável, porém não existe liberação para o meio externo não são considerados como fonte de risco.

Se for estabelecido que o equipamento possa liberar material inflamável para a atmosfera, é necessário, em primeiro lugar, determinar o grau de risco de liberação de acordo com as definições, estabelecendo a frequência e a duração da liberação. Deve ser reconhecido que a abertura de partes de sistemas de processo fechados deve também ser considerada fonte de risco quando da elaboração da classificação de áreas. Por meio deste procedimento, cada fonte de risco deve ser denominada como de grau continuo, grau primário ou grau secundário conforme descrito a seguir (SOARES, 2015 e OTSUKA, 2011).

a) Fonte de risco de grau contínuo:

Ocorre liberação contínua da substância perigosa, ou quando a mesma ocorre muito frequentemente dentro de um período muito curto. Exemplo: Superfície de um líquido inflamável em contato contínuo com a atmosfera ou por longos períodos;

b) Fonte de risco de grau primário:

A liberação da substância ocorre ocasionalmente, porém de forma prevista na unidade. Exemplos: aberturas de válvula, respiros de tanques, bocais de carregamento de caminhões, bocas de visita de equipamentos, pontos de amostragem, dentre outros, para os quais é previsto haver a liberação do material inflamável para a atmosfera em condições normais de operação;

c) Fonte de risco de grau secundário:

Ocorre a liberação da substância perigosa em situações anormais de operação, de forma inesperada, tais como falhas em equipamentos ou vazamentos por rompimento de flanges. Exemplos: conexões e acessórios de tubulações, selos de bombas, compressores, válvulas de alívio, dentre outros, para os quais não se prevê a liberação do material inflamável para a atmosfera em condições normais de operação.

Jordão (2002) apresenta uma relação entre a classificação da zona de risco e a fonte, cujo grau de risco pode ser determinado de acordo com o número de horas com presença de mistura inflamável por ano. Tal relação pode ser observada na Tabela 3.

Grau da Fonte de Risco	Presença de Mistura Inflamável	ZONA
Contínuo	1000 horas ou mais	0
Primário	10 à 1000 horas	1
Secundário	Menos de 10 horas	2
booundurio	Menos de 1 hora	Área não classificada

Tabela 3 - Classificação da zona de risco com relação ao grau da fonte de risco.

2.3.3 Extensão das Zonas

A extensão de uma zona perigosa no interior de um equipamento, para a qual foi analisada a possibilidade de ocorrência ou presença de uma atmosfera explosiva, define-se como o espaço existente entre a superfície do líquido e as paredes do recipiente/equipamento em questão. A extensão de zonas depende da distância estimada ou calculada sobre a qual uma atmosfera explosiva de gases inflamáveis exista antes que esta possa se dispersar no ar para uma concentração abaixo do seu limite inferior de explosividade (LIE), com um fator apropriado de segurança (BULGARELLI, 2009: SANTOS, 2008).

Para estabelecer a extensão de uma zona perigosa proveniente de uma fonte de fuga que vaza para o exterior do equipamento devem-se analisar os seguintes parâmetros:

- A quantidade da fuga: quanto maior a quantidade, maior a extensão da zona perigosa. A quantidade depende de vários fatores, tais como a geometria da fonte, a velocidade, as condições de pressão e de temperatura, a concentração de gás e vapor e a volatilidade da substância inflamável;
- O Limite mínimo de explosividade: quanto menor for o LIE maior é a extensão da zona perigosa;

 A densidade relativa do gás ou do vapor: a extensão horizontal (ao nível do solo) da zona aumenta com a densidade relativa (gases mais pesados que o ar) enquanto a extensão vertical da zona aumenta com a diminuição da densidade relativa.

Se não houver ar suficiente, a fuga aumentará constantemente a quantidade de gás ou vapor inflamável no ar, aumentado progressivamente a extensão da área de risco durante todo o período de liberação até o equilíbrio ser alcançado.

CAPÍTULO 3

3. LIBERAÇÕES ACIDENTAIS

A análise de potenciais liberações acidentais, que podem ocorrer em situações anormais ou inesperadas, é útil no desenvolvimento de planos de resposta a emergências e como parte da análise de risco do processo. É também uma ferramenta útil na avaliação de métodos para prevenir esses lançamentos e na avaliação de propostas de estratégias de mitigação. Estimar e compreender o processo requer algum conhecimento do comportamento da fonte e da mecânica do transporte e dispersão atmosféricos.

3.1 Cenários de Liberação

As consequências de uma liberação acidental dependerão das propriedades físicas do material perigoso, do processo ou condições de armazenagem, da forma como a liberação ocorre e da possível interação mecânica e física subsequente com o meio ambiente. Isso porque a presença de obstáculos pode afetar o jato resultante da emissão e alterar as características da nuvem perigosa. Nesse contexto, os lançamentos podem ser categorizados como provenientes de condições de armazenamento pressurizadas ou não pressurizadas e também podem ser categorizados como tendo momento significativo ou desprezível (BRITTER,1998; BONNET et al., 2006; DAI, 2004).

As liberações acidentais nas indústrias normalmente duram um curto período de tempo (de segundos a minutos ou horas), sendo classificadas como instantâneas, finitas ou contínuas, de acordo com a duração da liberação. Segundo Dai (2004), uma liberação de duração finita é aquela que só existe por um período limitado de tempo, porém, quando uma liberação de duração finita dura horas ela pode também ser tratada como contínua e assim podem ser aplicadas técnicas de modelagem em estado estacionário. As liberações instantâneas são resultantes da falha catastrófica de um vaso e produzem uma nuvem que se expande rapidamente.

Ainda de acordo com Dai (2004), para determinar se uma liberação pode ser tratada como contínua, dois fatores devem ser considerados:

1) A duração da liberação;
A localização dos receptores mais próximos ou a distância máxima à menor concentração de interesse.

O tempo necessário para a substância perigosa atingir uma distância específica na direção do vento é comparado com a duração real da emissão. Se a duração da emissão for maior do que o tempo necessário para que o produto químico liberado alcance uma distância específica a favor do vento, a liberação pode ser considerada contínua. Caso contrário, ela deve ser considerada instantânea ou de duração finita.

O tempo de viagem (t) para uma distância na direção do vento (x) a partir do local de liberação pode ser estimado relacionando-o com a velocidade do vento ambiente (u) conforme mostra a Equação (3.1).

$$t = \frac{2x}{u_{\alpha}} \tag{3.1}$$

Existem vários cenários específicos de liberação que, como abordado anteriormente e em conformidade com Hanna (2009), dependem do material armazenado uma vez que ele possui propriedades termodinâmicas, fluido mecânicas e de transporte próprias, da geometria de armazenamento e do estado termodinâmico do material. Sendo assim, as substâncias inflamáveis podem escapar dos sistemas de armazenamento de forma diferente em relação ao estado e a taxa de emissão (BOSCH *et al.*, 2005).

a) Estado:

- Gás ou vapor (fase única);

 Líquido que dificilmente evapora durante o vazamento: o sistema contém líquido e vapor no seu interior com o vazamento ocorrendo abaixo do nível de líquido;

- Gás liquefeito ou líquido que se evapora durante o vazamento: a despressurização permite uma evaporação súbita fazendo com que o material seja liberado na forma de uma mistura de líquido e vapor.

b) Velocidade do vazamento: que pode ser alta ou baixa.

Outro fator que irá determinar o tipo de liberação é a localização geométrica da ruptura. Neste caso, a evolução do estado interno do recipiente de armazenamento durante a despressurização pode ocasionar três ou mais tipos de liberação diferentes.

- 1) A liberação de um gás como um jato de alta pressão, isto é, gás com momento;
- A liberação de um líquido que cai para uma superfície subjacente e subsequentemente evapora para produzir uma fonte principalmente gasosa, isto é, gás sem momento;

3) A liberação pressurizada de um material líquido ou de duas fases onde parte da fase líquida torna-se gás à medida que o material despressuriza. Os processos mecânicos e termodinâmicos levam a quebra do líquido em gotículas, a maior das quais pode cair para a superfície subjacente (*rainout*) e subequentemente mudar de fase. As gotículas restantes são suspensas como um aerossol e eventualmente evaporam, isto é, tem-se uma fonte dupla onde parte é um gás sem impulso ao nível do solo e parte um jato de duas fases com impulso.

Nesse sentido, o Quadro 2 mostra algumas características segundo Cox et al. (1990), que determinam o tipo de cenário de vazamento que pode ser definido para a emissão e dispersão de materiais inflamáveis que escapam em uma planta.

Estado	Momento	Densidade	Duração da Liberação
• Gás ou vapor (fase única);			
• Líquido sub resfriado (não			
flasheia);	 Alto; Baixo.	• Mais leve que a do ar;	• Instantânea;
 Líquido superaquecido 		• Neutra;	• Finita;
(flasheia);		• Mais pesada que a do ar.	• Contínua.
• Gás liquefeito pressurizado			
(flasheia).			

Quadro 2 - Características de determinação dos cenários de liberação.

DeVaull et al. (1995) descreve a evolução de uma liberação dividindo o problema em uma série de estágios onde as divisões básicas incluem:

- Uma região fonte isolada, onde as estimativas da taxa de liberação são quase independentes das condições ambientais;
- Um regime acoplado fonte / dispersão, onde tanto os parâmetros da fonte quanto os ambientais são importantes na estimativa do campo de concentração;
- Uma região final onde o vento ambiente e as condições meteorológicas dominam o processo de dispersão.

Estes segmentos são ilustrados na Figura 3 onde a análise inicia-se com um vazamento no qual é necessário determinar a taxa de liberação em massa e a duração do evento através de uma estimativa do inventário ou uma estimativa do intervalo de tempo, antes que o problema possa ser corrigido. São necessárias estimativas da fase de liberação (líquido, vapor ou aerossol), velocidade do fluido e densidade, bem como a taxa de alteração da taxa de libertação de massa ao longo do tempo, para determinar a fase seguinte no processo de dispersão.

Figura 3 - Estágios de uma liberação acidental e processo de dispersão na direção do vento.



Fonte: Adaptado de DeVaull et al. (1995).

No regime acoplado de fonte / dispersão, tanto a fonte como as condições ambientais são importantes. Esta região intermediária encontra-se muitas vezes dentro do intervalo de interesse na direção do vento em muitas liberações acidentais. Nesta região, as condições de liberação podem afetar o campo de vento e vice-versa. Tanto a liberação de jatos como a dispersão de gases pesados estão dentro deste regime, onde a velocidade e a densidade iniciais da pluma, bem como o campo de vento ambiente, afetarão o caminho da nuvem e a taxa de diluição. Esta região acoplada pode também incluir estimativas da taxa do fluxo de vapor, onde, por exemplo, a taxa de evaporação de uma poça líquida pode ser uma função da velocidade do vento.

No estágio final de dispersão, a concentração do gás liberado será baixa e sua presença não altera o campo de vento ambiente ou a turbulência atmosférica. Sob estas condições a liberação é dispersa como um poluente passivo pela turbulência ambiente. Para os poluentes diluídos ou baixas taxas de liberação (tais como em emissões fugitivas), a dispersão passiva domina o processo de diluição em toda o intervalo de interesse a favor do vento.

A Figura 4 lista, de maneira mais completa, um número de itens que podem ajudar na definição dos parâmetros que regem o cenário de liberação em uma determinada análise. Conforme mostrado, esses itens incluem uma definição da origem, definição das condições ambientais, tipos de liberação e possíveis cenários de liberação. A partir desta informação, os

mecanismos que regem a liberação e dispersão podem ser identificados e utilizados na análise. Nesse contexto, os possíveis tipos de liberação serão abordados nos seguinte subtópicos.



Figura 4 - Parâmetros necessários para definir as condições de liberação.

Fonte: Adaptado de DeVaull et al. (1995).

3.2 Tipos de Liberação

A previsão do comportamento da substância a ser liberada pode ser feita através da análise de um diagrama de fases, exemplificado na Figura 5. Tal diagrama indica o estado da substância com a determinação de duas propriedades como pressão e temperatura. Entre as regiões ditas monofásicas encontram-se as regiões bifásicas, ou seja, condições onde duas fases podem coexistir em equilíbrio.





De maneira mais detalhada a Figura 6 ilustra a linha de saturação para uma substância volátil hipotética em um diagrama pressão-temperatura no qual os pontos (T_0 , P_0), (T_{nbp} , P_a) e (T_{atm} , P_{atm}) correspondem as condições de armazenamento, o ponto normal de bolha e as condições atmosféricas, respectivamente. Em relação as condições de armazenamento, um líquido é caracterizado como sub-arrefecido se a temperatura de armazenamento T_0 for inferior a temperatura de saturação na pressão de armazenamento P_0 , e como superaquecido se a temperatura T_0 for superior à temperatura de saturação em P_0 .

Os termos sub-arrefecido ou superaquecido são também utilizados quando a temperatura do fluido é comparada com a temperatura de saturação (T_{sat}) à pressão ambiente (ponto normal de ebulição). Isto irá afetar o estado do material à medida que sai do recipiente de armazenamento. Na maioria das liberações que flasheiam, o líquido dentro do reservatório é sub-arrefecido ou saturado com referência às condições de armazenamento (T₀, P₀), onde T₀ é inferior ou equivalente a temperatura de saturação avaliada na pressão de armazenamento (T_{sat} (P₀)) e superaquecido com referência às condições atmosféricas (T_{atm}, P_{atm}), onde T₀ é superior a temperatura de saturação atmosférica (T_{sat}(P_{atm})) (HANNA, 2009; ICHARD, 2012).



Figura 6 - Curva de saturação para uma substância química hipotética.

Fonte: Adaptado de Ichard (2012).

As variáveis elementares de entrada que provavelmente estarão disponíveis para os usuários de modelos de dispersão irão gerar a série de esquemas apresentados na Figura 7, onde as condições no ponto 1 referem-se à substância a montante do ponto de liberação (condições de armazenamento) e o ponto 2 representa as condições atmosféricas ou de campo no qual a liberação se dispersa. Embora seja uma representação bastante elementar, isto permite que os processos que ocorrem durante a despressurização através do orifício de saída sejam agora representados.

Na Figura 7(a) a substância encontra-se sub-arrefecida em relação as condições de armazenamento e a medida que o líquido se aproxima da saída a pressão diminui. Neste caso, as condições do fluido se mantêm acima da linha de transição líquido/vapor, dessa forma o líquido permanecerá em estado de sub-arrefecimento e será atomizado como um jato homogêneo monofásico que se desintegra através da integração aerodinâmica e instabilidade das ondas na superfície do líquido. A transferência de calor e massa é subsequentemente controlada por evaporação da superfície da gota, convecção forçada e processos de radiação a jusante. Os vários mecanismos associados com a quebra de jato nestas condições são coletivamente denominados *break-up* mecânico de jatos.

Um cenário mais complexo e relevante para o âmbito deste trabalho, é observado na Figura 7(b) onde as condições iniciais novamente estão acima da linha de saturação (mudança de fase líquido/vapor) porém, as condições finais a jusante do ponto de liberação encontram-se abaixo desta mesma linha. Nesta situação, a pressão do fluido se tornará menor que a sua pressão de vapor provocando o processo denominado de Flasheamento.

Se o fluido é efetivamente armazenado sob condições saturadas, a situação representada pela Figura 7(c) é avaliada. Neste caso, o fluido é liberado como uma mistura de duas fases. Porém, se as condições nas quais o fluido se encontra inicialmente estão abaixo da linha de saturação, conforme a Figura 7(d), ele será armazenado no estado de gás ou vapor e liberado da mesma forma.



Como abordado anteriormente, o risco associado com a liberação acidental de materiais tóxicos e / ou inflamáveis é uma forte função das condições de origem tais como a geometria, taxa de descarga, composição, e fração de aerossol. Dessa forma, projetos mais seguros e medidas de atenuação requerem primeiro uma compreensão e, em seguida, redução dos fatores que afetam a taxa de emissão e duração. A formação de aerossol e o *rainout* são uns dos fatores mais importantes que afetam a energia eficaz da fonte e a duração de um evento acidental.

De acordo com Johnson e Woodward (1999), os principais fatores que influenciam a quantidade de material transportado pelo ar durante uma libertação acidental é a pressão de armazenamento e a volatilidade do material que se reflete em seu ponto normal de ebulição ou

na curva da pressão de vapor. Liberações de gases pressurizados em geral se dissipam rapidamente pela mistura energética associada com um jato de elevado momento. Liberações de líquidos pressurizados muitas vezes representam uma ameaça maior, pois eles podem formar uma grande massa de ar carregada de gotículas de aerossol que aumenta a densidade da nuvem. As nuvens mais pesadas que o ar tendem a se dispersar menos que nuvens flutuantes, tanto porque normalmente fluem em baixas velocidades do vento e próximas ao chão, quanto pela dispersão que é suprimida dentro de uma nuvem de gás pesado.

Líquidos armazenados abaixo de seu ponto de ebulição, ou como líquidos subresfriados, normalmente apresentam um risco menor pois os líquidos descarregados formam pouco ou nenhum aerossol no ar atingindo o chão imediatamente e formando uma poça com volatilidade relativamente baixa. No entanto, até mesmo materiais de alto ponto de ebulição podem formar aerossóis caso a liberação ocorra a partir de um ponto elevado ou, se eles são armazenados sob pressão com um gás de preenchimento.

3.2.1 Liberação de Gás

Quando um gás escapa de um processo existe uma fronteira entre o momento em que o gás é influenciado pelas suas características de processo ou termodinâmicas (pressão, temperatura, etc.) e o ponto em que é influenciado pelas condições ambientais (velocidade do vento, temperatura, etc.). Dependendo da temperatura de vazamento do gás, um efeito térmico adicional pode ocorrer. Um gás quente tenderá a aquecer o ar circundante e criar correntes térmicas ascendentes ou, alternativamente, os gases frios gerarão correntes térmicas descendentes.

Alguns fatores influenciam na dispersão dos gases.

- Altura de liberação;
- Rugosidade do solo;
- Estabilidade atmosférica;
- Velocidade do vento.

Uma liberação elevada irá facilitar a dispersão, levando à ocorrência de menores valores de concentração de gás ao nível do solo. Dessa forma, as maiores concentrações ocorrem em pontos distantes da fonte.

3.2.1.1 Gás Flutuante

Se uma liberação de gás tem um estado estável, então ele imediatamente gera uma nuvem ou uma pluma. Se esta nuvem ou pluma é mais do que 2% menos densa do que o ar, então a liberação é considerada flutuante e irá subir naturalmente como pode ser observado na Figura 8. O movimento relativo de uma nuvem de gás ascendente gera turbulência nas suas extremidades, resultando numa mistura rápida do gás e do ar que expande lateralmente as nuvens de gás em ascensão. Como as nuvens de gás sobem, diluem e expandem lateralmente sua densidade diminui, resultando na nuvem de gás tornando-se neutra em relação ao ar. Uma vez que a nuvem de gás perde sua flutuabilidade as condições ambientais tornam-se dominantes e a nuvem de gás pode mover-se em qualquer lugar.



Figura 8 - Pluma característica formada por um vazamento contínuo de gás flutuante.

Fonte: CCPS (2000).

3.2.1.2 Gás com Flutuabilidade Neutra

Um gás neutro flutuante tem uma densidade equivalente a do ar e não possui movimento intrínseco para cima ou para baixo. Nesse caso as nuvens de gás são impulsionadas pelo vento ou por correntes de ar artificiais. Nuvens de gás neutras flutuantes misturam-se extremamente rápido com a atmosfera circundante devido a turbulência e vórtices. Quando os gases tóxicos se misturam com o ar até seus limites locais de trabalho, eles atingirão o equilíbrio de densidade com o ar e se comportarão como gases neutros.

Muitos gases de processos provenientes de indústrias de petróleo, refinarias, indústrias de fertilizantes, dentre outras, podem ter pesos moleculares maiores que o ar e são mais densos, mesmo à temperatura ambiente. A força motriz para a migração desses gases é a gravidade, portanto a dispersão normalmente segue a inclinação do terreno.

Uma nuvem de gás denso cairá como uma cachoeira, fluirá ao longo da superfície como a água e pode viajar distâncias longas antes que a diluição natural ocorra ou a turbulência disperse a nuvem completamente. Longas distâncias de dispersão criam maiores áreas de risco. Na proximidade do solo, uma nuvem densa tenderá a se dispersar lateralmente e a difusão vertical será suprimida. Isto pode dar origem a concentrações elevadas ao nível do solo (BHOSALE et al., 2015).

A dispersão da nuvem proveniente de uma liberação de gás denso pode ser dividida em cinco fases:

- 1) Fonte de emissão;
- 2) Aceleração inicial e fase de diluição;
- 3) Uma fase inicial dominada pela gravidade ou fase de queda;
- 4) A fase de transição;
- 5) Fase com flutuação dominante.

A dispersão de uma nuvem ou pluma de gás denso processa-se através de várias fases (em liberações contínuas), dependendo do mecanismo físico dominante envolvido, como mostrado na Figura 9.



Figura 9 - Fases de dispersão de uma nuvem de gás denso.

Fonte: Adaptado de Bhosale et al. (2015).

Nuvens de gás denso não são facilmente distorcidas pelo vento, no entanto, estruturas, paredes e diques podem alterar ou controlar o fluxo da nuvem de gás em movimento. Se a nuvem de gás é composta de gases frios que são normalmente flutuantes à temperatura ambiente, então esta nuvem atuará de forma um pouco diferente. Inicialmente, a temperatura da nuvem de gás fará com que ela se comporte como uma densa nuvem de gás que, à medida que aquece, tem suas características modificadas de "densa" para "flutuante". Nuvens de gás denso e frias são por vezes fáceis de ver, uma vez que condensam o vapor de água da atmosfera circundante para produzir um nevoeiro visível.

3.2.2 Descrição Geral de Uma Emissão Gasosa

Segundo Ibars e Torrent (2005), os gases e vapores emitidos neste tipo de liberação tendem a se espalhar no ar de forma a preencher todo o espaço disponível. Sua emissão a baixa velocidade forma uma pluma onde as moléculas de gás ou de vapor têm uma baixa quantidade de movimento, de modo que se distanciam da fonte de vazamento e se diluem no ar, quer por difusão ou por diluição turbulenta de acordo com a velocidade relativa do ar na área de vazamento. A pluma toma a direção do vento ou, na ausência dele, sobe ou desce de acordo com a densidade relativa dos gases ou vapores em relação ao ar, como descrito anteriormente.

A emissão de gás ou vapor em alta velocidade constitui um jato que acaba se diluindo no ar apenas pela transferência de momento (massa x velocidade). Inicialmente, o jato é dominante em relação à influência do ar e assume uma forma cônica na direção de emissão, mas à medida que as moléculas de gás ou vapor se distanciam da fonte de vazamento perdem velocidade e vão se diluindo no ar e a direção do jato é influenciada pela direção do vento (IBARS e TORRENT, 2005).

De acordo com o Programa de Gerenciamento de Risco em Dispersão de Gás da empresa Dräger, uma liberação de gás sob pressão irá produzir uma nuvem de gás no ponto de liberação, na qual a concentração no ponto de liberação é igual a concentração do processo. A densidade do gás e o vento dominante moverá a nuvem de gás de uma maneira predeterminada. Independentemente da nuvem de gás ser flutuante ou densa, sua uniformidade não é constante e muda drasticamente com a distância e o tempo.

À medida que o gás se dispersa a partir do seu ponto de liberação, é formada uma pluma de gás. A concentração dentro da pluma muda constantemente, ela pode aumentar ou diminuir dependendo do movimento da pluma.

Plumas movendo-se através de um detector de gás irão gerar medições aleatórias. Sendo assim, o detector irá medir concentrações elevadas, porém, como a pluma é desviada o detector de pode medir baixas concentrações. Este tipo de modelo de dispersão de gás é chamado de dispersão gaussiana. Eventualmente, a pluma irá dispersar completamente e seu conteúdo se tornar parte da atmosfera ambiente.

As emissões de gás a alta pressão produzirão inicialmente jatos gasosos cuja forma e distância irão variar. No entanto o formato do jato é razoavelmente estável, possuindo uma elevada concentração ao longo do seu eixo, que diminui conforme se caminha para a extremidade (Figura 10). Devido às altas velocidades de gás experimentadas, o gás liberado mistura-se rapidamente com o ar devido à turbulência. Diluição rápida cria uma nuvem de gás naturalmente flutuante.





3.2.3 Liberação de Líquido

Derramamentos de líquidos podem resultar de acidentes que vão desde uma pequena fuga até uma falha em um reservatório. Existem muitas variações dependendo da natureza do incidente, do tipo de material liberado, do ambiente e de outros fatores. A mais comum é a formação de poça numa superfície, com o material a ser convertido da fase líquida para a fase gasosa devido à transferência de calor para a poça, e a vaporização conduzida pelo vento na interface líquido/vapor. A poça pode formar-se quase instantaneamente, ou pode ser continuamente alimentada de um vazamento mais lento. Seu comportamento pode mudar ao longo do tempo, à medida que o líquido se espalha e o calor é transferido (PRICE et al., 2016; de DEVAULL et al., 1995).

A superfície na qual a poça é formada e se espalha é referida como o substrato. Este pode ser o solo, um corpo de água, a superfície de uma estrutura, como uma plataforma de petróleo, ou outra estrutura de confinamento secundário. A natureza do substrato é importante para determinar a quantidade de transferência de calor para a poça, embora outras fontes de calor, tais como insolação, também possam ser importantes (PRICE et al., 2016).

Quando a velocidade de saída do líquido, a partir do sistema de armazenamento, é pequena ou a fonte de vazamento é ampla, a poça se forma sobre o solo e abaixo do ponto de liberação, como pode ser observado na Figura 11. Quando a velocidade de saída é elevada (pressão interna elevada) e a fonte não é muito ampla, o líquido é pulverizado para fora e pode percorrer uma certa distância antes de atingir o solo e formar a poça.







O comportamento de espalhamento de uma poça depende da natureza do substrato, bem como das propriedades físicas do líquido derramado. Segundo Price et al. (2016), ocasionalmente é feita uma distinção entre uma "poça" e um "derramamento", com o primeiro tendo alguma forma de confinamento secundário e mantendo uma profundidade significativa, e o último sem confinamento, se espalhando livremente para formar uma camada muito fina de líquido.

A emissão de um líquido inflamável evapora dependendo de suas características e da diferença entre as condições de pressão e temperatura em que ele estava no interior do sistema de armazenamento e as do meio ambiente. Se o líquido sai a uma temperatura inferior a

temperatura de ebulição correspondente à pressão ambiente, a taxa de evaporação é pequena (IBARS e TORRENT, 2005).

Se a substância dentro do sistema de armazenamento é um líquido sob pressão, ou sai a uma temperatura superior a de ebulição à pressão atmosférica, no ponto de vazamento, sofre uma vaporização repentina e instantânea e em parte uma névoa é formada. A percentagem de líquido que não evapora e não forma névoa irá formar a poça a partir da qual continuará evaporando.

A vaporização a partir de uma poça pode ser geralmente descrita de acordo com dois regimes principais: ebulição ou evaporação, associado com líquidos criogénicos e nãocriogénicos (voláteis), respectivamente. Os líquidos criogénicos têm pontos de ebulição que são significativamente mais baixos do que as temperaturas ambiente típicas, uma vez que as suas pressões de vapor saturadas são iguais a pressão ambiente à temperaturas relativamente baixas. Eles, portanto, tendem a sofrer inicialmente um comportamento de ebulição à temperatura ambiente. Líquidos não-criogénicos, ou seja, aqueles com pontos de ebulição significativamente superiores à temperatura ambiente, tendem a sofrer apenas a evaporação, uma vez que a transferência de calor para a poça pode ser insuficiente para elevar a temperatura destes líquidos até a temperatura de ebulição.

Várias situações possíveis podem ocorrer na evaporação de uma poça líquida. Estas incluem:

- 1) Um líquido em ebulição;
- 2) A evaporação de um líquido volátil;
- 3) A evaporação de um líquido relativamente não volátil.

3.2.3.1 Poças de Líquidos em Ebulição

A transferência de calor para uma poça ocorrerá quando ela estiver mais fria que o ambiente. Esta transferência é impulsionada pela convecção do ar na superfície superior da poça e por condução a partir do substrato abaixo da mesma. Com alguns fluidos criogênicos, o fluxo de calor na poça pode ser grande o suficiente para "ferver" o líquido. Neste caso, a poça permanece no seu ponto de ebulição normal, e a taxa de evaporação total é igual a razão do fluxo total de calor pelo calor de vaporização para o fluido (DEVAULL et al., 1995).

Com um líquido criogênico derramado em terra, o fluxo de calor na poça irá diminuir ao longo do tempo à medida que a superfície do solo esfria até o ponto de ebulição líquido e aumenta a profundidade de penetração do solo arrefecido. Para os líquidos criogénicos flutuantes derramados sobre a água, a circulação convectiva constante da água mantém a transferência de calor por unidade de área para a poça e a taxa de evaporação em massa por unidade de área constante ao longo do tempo.

3.2.3.2 Evaporação de Líquidos Voláteis

Para líquidos relativamente voláteis, a transferência de calor para a poça é equilibrada pelo calor perdido devido à vaporização líquida. No entanto, com um líquido volátil, a perda de calor da poça devido à ebulição ou evaporação rápida, pode ser grande o suficiente para causar um auto-arrefecimento do líquido restante. Neste caso, a temperatura da poça diminuirá abaixo do seu ponto de ebulição ou abaixo da temperatura ambiente (DEVAULL et al., 1995).

Um limite inferior na temperatura da poça é dado pela temperatura de saturação adiabática (T_{sa}). Esta temperatura é alcançada quando uma mistura de ar e vapor saturados é produzida com um balanço de energia entre o calor de vaporização do fluido liberado e o calor sensível de arrefecimento do ar desde o ambiente até T_{sa} . A temperatura real do equilíbrio dinâmico da poça será um pouco maior que T_{sa} , dependendo da proporção de das taxas de transferência de calor e massa para a poça.

3.2.3.3 Evaporação de Líquidos Relativamente Não - Voláteis

De acordo com DeVaull et al. (1995), a evaporação de derramamentos de líquidos relativamente não-voláteis é impulsionada principalmente pela transferência de massa convectiva na superfície superior da poça. Os argumentos de similaridade da camada limite para os números adimensionais de Schmidt, Nusselt e Peclet são usados para derivar um coeficiente de transferência de massa para um cenário particular. Este coeficiente é uma função da velocidade do vento, da geometria da poça e de vários coeficientes empíricos. A taxa de evaporação total é função da área da poça, da concentração de vapor ambiente e da pressão de vapor do produto químico e da derivada do coeficiente de transferência de massa.

Neste cenário, o calor perdido da poça por vaporização é equilibrado pela transferência de calor para a poça mais quaisquer mudança líquida no calor sensível do líquido. Para líquidos relativamente não-voláteis, a taxa de evaporação será baixa e, uma vez que as diferenças

transitórias iniciais na poça e na temperatura atmosférica forem equilibradas, a temperatura da poça não se afastará muito da temperatura ambiente.

3.2.3 Liberação Bifásica

Muitos acidentes envolvem lançamentos bifásicos de produtos químicos perigosos para a atmosfera. Em muitas plantas químicas e de processo, o gás é armazenado e transportado na sua fase líquida sob a sua pressão saturada. Em caso de acidente de ruptura do tubo, o material contido no tanque é ejetado através da abertura como um jato de duas fases que depois se dispersa na atmosfera circundante. Para estimar os efeitos da dispersão, é necessário calcular o termo de origem bifásico e, em particular, o fluxo mássico (HEBRARD e LACOME, 2008).

Os gases liquefeitos são amplamente utilizados na indústria devido às suas propriedades químicas ou físicas. Em paralelo, inúmeros processos industriais utilizam fluidos que são superaquecidos em comparação com condições de temperatura ambiente. Após uma perda de confinamento em torno de uma instalação, os perigos enfrentados podem ser instantâneos, como ocorre com a explosão de produtos inflamáveis, ou diferir como é o caso de liberações de produtos tóxicos (BONNET et al., 2006).

Visto que o objeto de estudo deste trabalho envolve liberações de gases liquefeitos pressurizados, a descrição do processo de uma liberação bifásica será direcionada para este cenário.

3.2.3.1 Liberação de Gás Liquefeito

O armazenamento de gases na sua fase liquefeita é muito comum na indústria pelo fato do espaço total requerido para o seu armazenamento ser reduzido, além de facilitar o transporte do gás. Existem duas maneiras de liquefazer gases, sendo a primeira o aumento da pressão e a segunda a redução da temperatura.

Quando um reservatório contém um gás liquefeito sob pressão e ocorre uma perda do confinamento, o líquido que escapa é submetido a uma diminuição súbita da pressão, à pressão atmosférica. O líquido estará inicialmente à temperatura ambiente se o reservatório estiver em equilíbrio térmico com o seu ambiente, e em uma temperatura inferior se o líquido for mantido sob refrigeração. Se o gás liquefeito pressurizado flui através de um tubo, a pressão local se tornará menor que a pressão de vapor do material líquido. Essa queda de pressão ocorre devido ao atrito com as paredes do tubo, causando o superaquecimento do líquido que flui, podendo

aparecer uma fase gasosa devido à vaporização de parte do material (BOSCH *et al.*, 2005; RAMIRO, 1998).

Quando um líquido pressurizado escapa, existem duas fases associadas à fuga:

- Um jato de líquido será liberado e irá evaporar instantaneamente. Esta evaporação é chamada de "*flash*";
- O líquido em evaporação puxa energia de si próprio e da atmosfera circundante e por sua vez arrefece o fluido do vazamento. O arrefecimento do fluido evita a evaporação total produzindo, dessa forma, um aerossol.

Se o vazamento é grande o suficiente, então a poça fria do fluido pode acumular-se no chão e irá evaporar-se para produzir uma liberação de gás. A nuvem de aerossol frio vai agir como um gás denso. Uma liberação de líquido pressurizado pode frequentemente ser vista a olho nu pois o efeito de arrefecimento da evaporação condensará a humidade ambiente para produzir uma nuvem de vapor.

Durante o *flash*, uma quantidade considerável de líquido pode ser arrastada na forma de gotas, com um aumento muito grande na área de evaporação. Parte do líquido em gotas pode eventualmente cair novamente para o solo, enquanto as demais se evaporam, antes da sedimentação ter lugar, usando o calor do ar ambiente. Quanto a poça líquida que permanece no chão, se o derramamento é pequeno, a evaporação de líquidos superaquecidos é geralmente tão rápida que todo o líquido é consumido em um tempo muito curto e não há formação de poça. Em liberações maiores, após a rápida evaporação inicial, o líquido e o solo adjacente têm arrefecido suficientemente para evaporação da superfície da poça prosseguir mais gradualmente. (RAMIRO, 1998).

A dispersão atmosférica deste jato bifásico é particularmente dependente do ambiente. Nos casos em que não existem obstáculos ao longo do percurso do jato, Bonnet et al. (2006) aponta diferentes contribuições para a formação de uma nuvem inflamável ou tóxica.

- A quantidade de produto suscetível de ser vaporizada quase instantaneamente e a distribuição da dimensão das gotículas devida ao flash próximo ao orifício de vazamento;
- A quantidade de produto suscetível de formar uma poça no solo;
- A quantidade de produto suscetível de ser carregada pelo ar sob a forma de aerossol.

Neste caso, a estimativa das principais quantidades de vapor liberado no ar consiste em estudar a formação e evaporação das gotículas formadas, e depois a evaporação da poça

formada. Esta estimativa é importante para definir um termo fonte realista que irá ser usado em um modelo de dispersão atmosférica.

De maneira geral, o jato de vapor carregado de gotículas (*spray*) irá arrastar (*entrainment*) o ar e as gotas no jato irão evaporar devido ao calor trazido para o jato pelo ar. Uma parte dessas gotículas pode cair sobre o solo (*rainout*), em determinado tempo t, e formar uma (evaporação) poça líquida. O vapor de água no jato, presente devido a humidade relativa do ar, pode condensar. Finalmente todas as gotículas evaporam e um jato monofásico, que ainda possa conter vapor de água condensado, permanece. Essas etapas do vazamento, que envolvem os princípios básicos de jatos flasheados, são resumidas na Figura 12 e descritas detalhadamente mais adiante. O jato consiste em 3 áreas (LACOME et al., 2012):

- I. <u>A zona de expansão</u> (*flash*, atomização): Aqui, o fluido expande-se a partir da pressão no furo do vaso para a pressão atmosférica. No final desta zona, assume-se que o jato consiste apenas em uma fase gasosa e uma fase líquida. Ambos estão à temperatura de ebulição. Durante a expansão ocorre a atomização do jato que é quebrado em gotas;
- II. <u>A zona de arrastamento</u> (separação secundária, evaporação das gotas): O jato turbulento impulsiona o ar ambiente. A energia trazida pelo ar, cuja temperatura é maior que a do jato, é utilizada para a vaporização de gotas no jato bifásico;
- III. <u>A zona de dispersão final</u>: O arrastamento pela atmosfera do ar aquece o jato e diminui sua velocidade até a velocidade do vento.



Figura 12 - Vista esquemática de um vazamento bifásico.

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

Tem sido observado experimentalmente que a região de "expansão" é composta de gotas grandes movendo-se com o aumento da velocidade. Esta começa a diminuir na região de arrastamento devido a mistura com o ar ambiente à medida que o jato se propaga (Figura 13).

A temperatura axial mantém-se diminuindo bem abaixo da temperatura de ebulição à pressão ambiente atingindo seu mínimo com a evaporação das gotículas. Além desse ponto, a temperatura sobe para o valor ambiente. O tamanho e a velocidade média das gotículas também diminuem devido à evaporação na região de arrastamento (CALAY e HOLDO, 2007).





3.2.3.1.1 Expansão e Flasheamento

Termodinamicamente, o *flashing* é resultado de uma súbita redução da pressão sobre um líquido até que o ponto de bolha é atingido. Uma maior redução da pressão vai deixar o líquido sobreaquecido ou a uma temperatura mais elevada do que a temperatura de saturação correspondente à pressão, e o líquido tende a ser convertido em vapor de forma a recuperar o equilíbrio. Sob condições adiabáticas o vapor formado pode obter seu calor latente de vaporização apenas à custa do calor sensível do líquido remanescente. O equilíbrio será alcançado quando a fração de líquido convertido em vapor tiver extraído energia suficiente a partir do líquido residual para arrefecer as duas fases à temperatura de saturação ou de equilíbrio (BROWN e YORK, 1962).

Na região de expansão, o gás liquefeito, ao entrar em contato com o ambiente, expande a medida que sua pressão diminui. Esta, atinge um valor menor que a pressão de saturação provocando o flasheamento do produto liberado que resultará em uma fase vapor e uma fase líquida composta de gotículas com diferentes tamanhos, que estarão em equilíbrio termodinâmico. Dessa forma, o *spray* é caracterizado como polidisperso e as gotas maiores podem depositar-se no solo.

No fim da região de expansão o fluxo é de duas fases e o *spray* líquido precisa ser caracterizado. Este fluxo é assumido homogêneo o que significa que a velocidade e a temperatura das gotas são iguais as da fase vapor. A distribuição de velocidade e temperatura da gota são uniformes.

3.2.3.1.2 Evaporação e Arrastamento

À medida que o jato move-se a jusante da região de expansão, as características turbulentas do jato promovem o contato das gotas com ar arrastando-o. fases se dispersa, as gotículas entram em contato com o ar provocando o arraste do mesmo. Neste contato haverá transporte de energia, devido ao gradiente de temperatura, provocando a evaporação das gotículas, que se encontram a uma temperatura inferior à ambiente, e consequente transporte de massa. Para um jacto de líquido, o efeito desta diluição com ar é aumentar a evaporação e por conseguinte arrefecer o ar arrastado, o que pode resultar na formação de um componente de aerossol de água binário ou separado sob a sua nova condição de pressão de água saturada.

Nesta região pode haver a ocorrência de chuva ou *rainout*, onde gotículas com diâmetros maiores que um diâmetro máximo podem sair do eixo de propagação do jato e atingirem o solo. Para saber se ocorrerá a chuva, determina-se o tamanho da gota, a qual é considerada representativa de todas as outras, e o tamanho máximo abaixo do qual o fenômeno *rainout* não ocorre. As gotas remanescentes continuam arrastando o ar e evaporando, dessa forma, elas iram diminuir ao longo do jato até evaporarem completamente. O processo de *rainout* pode ajudar a reduzir as concentrações na nuvem de vapor resultante e, por outro lado, a evaporação a partir da poça aumenta a duração do perigo (WITLOX *et al.*, 2010; ICHARD *et al.*, 2015).

O processo de *rainout* pode, em grande parte, ser aumentado se o jato de duas fases for atingido por um obstáculo. Neste caso, o efeito da chuva nas concentrações de gás a jusante é duas vezes maior. Por um lado tem um efeito positivo pois a massa de produto químico no interior do jato é reduzida e, portanto, são reduzidas as concentrações de gás a jusante. Por outro lado, pode ter um efeito negativo pois a duração do perigo pode ser aumentada uma vez que, a poça pode continuar a evaporar-se muito tempo após a liberação ter parado. O momento do jato diminui progressivamente e a diluição adicional do produto químico é controlada pela turbulência atmosférica. Devido ao seu peso molecular maior do que o ar, muitos produtos químicos tóxicos e inflamáveis se comportam como nuvens densas. O efeito da nuvem densa é reforçado pela presença de gotículas de líquido dentro da nuvem (LACOME et al., 2012).

Ainda nesta região é possível haver vapor de água condensado devido a humidade relativa do ar. A medida que as gotículas se dispersam com o jato, podem entrar em contato com o vapor de água e condensá-lo, este pode evaporar-se novamente devido a transferência de energia com o ar. Ao final da região de arraste só haverá o vapor do componente químico que foi liberado, ar seco e vapor de água (podendo haver algumas gotas de água).

CAPÍTULO 4

4. MODELOS DE EMISSÃO E DISPERSÃO

A modelagem de liberações acidentais pode ser necessária para o planejamento industrial de longo prazo do local, onde é usada para verificar os efeitos de diferentes cenários de liberação acidental, e assim ajudar a determinar o terreno, a meteorologia e as áreas residenciais circundantes mais favoráveis para a prevenção de danos significativos para os moradores. Além disso, também é necessária na identificação dos tipos de liberações acidentais que poderiam resultar em efeitos adversos significativos a favor do vento, permitindo o planejamento da prevenção através da concepção de equipamentos de mitigação e planejamento de emergência através de estratégias de evacuação.

Este tipo de modelagem também é usada como uma ferramenta de consequência para avaliação de risco e por serviços de resposta de emergência se uma liberação acidental realmente ocorrer. As saídas do modelo são usadas para identificar pessoas potencialmente afetadas e estimar os requisitos para evacuação.

Essa modelagem requer tanto um modelo de emissão de origem, devido à natureza das liberações acidentais, como também um modelo de transporte e dispersão. Dessa forma, uma vez definido o tipo de incidente (cenário), modelos de origem são selecionados para descrever como os materiais são liberados no processo. Um modelo de dispersão é subsequentemente utilizado para descrever como o material é transportado a favor do vento e dispersado para alguns níveis de concentração (AICHE, 2000).

Os modelos de origem são usados para definir quantitativamente o cenário de liberação estimando as taxas de emissão, quantidade total liberada (ou duração total de liberação), extensão do flash e evaporação de uma poça de líquidos, e formação de aerossol. Os modelos de dispersão convertem as saídas das condições de origem em áreas de concentração a favor do vento a partir da fonte. A relação entre os modelos de emissão e dispersão, e os vários tipos de modelos, são mostrados esquematicamente na Figura 14 (AICHE, 2000).



Figura 14 - Fluxograma para os modelos de emissão e dispersão.

Fonte: Adaptado de Aiche (2000).

Como pode ser observado, após a definição do estado da liberação é necessário verificar se há a evaporação de parte do componente liberado para vazamentos líquidos ou bifásicos. Caso haja, deve ser utilizado um modelo de fluxo bifásico com *flash* para a liberação bifásica, e de evaporação parcial para o vazamento de líquido com temperatura acima do ponto de bolha da substância. Caso não ocorra a evaporação parcial, os modelos utilizados serão de fluxo bifásico e sem evaporação parcial para a liberação bifásica e líquida, respectivamente.

Cada um destes modelos irá recair na situação de presença, ou não, de um jato de vapor carregado de gotículas, ou seja, aerossol (Ponto 3 do fluxograma). A presença de gotículas exige um modelo que descreva a fase vapor e líquida que constituem o jato.

Conforme mencionado, as gotículas podem gerar uma poça a partir do fenômeno *rainout* (chuva), para esta situação será necessário um modelo de formação e evaporação dessa poça (Ponto 2). Salienta-se que o vazamento de um líquido com temperatura abaixo do ponto de ebulição da substância liberada, também formará a poça. Se a chuva não ocorre, implica dizer que todas as gotas evaporam antes ou assim que chegam ao solo e um modelo de transporte e evaporação do aerossol deve ser utilizado.

Todos os tipos de liberação resultaram na formação e dispersão de uma nuvem de vapor para a qual o tipo de modelo a ser aplicado irá depender, dentre outros fatores, da densidade relativa do gás (Ponto 1). Dessa forma, podem ser empregados modelos de dispersão para gases densos, neutros ou leves, a depender das propriedades da nuvem.

As etapas contidas no fluxograma da Figura 14 são também apresentadas na Figura 15 de uma maneira mais simplificada. Como se pode observar, após ser identificada a fase da substância no momento da liberação (gás, líquido ou fluido bifásico) e sendo ela bifásica, serão verificadas as condições de vazamento, tais como:

- Flasheamento (evaporação parcial);
- Formação de aerossol;
- Condensação de substância (chuva);
- Formação de poça.

Nota-se que a liberação de substâncias inflamáveis possui uma gama de possibilidades e que os modelos de origem e dispersão são altamente acoplados, com os resultados do modelo de origem sendo usados para selecionar o modelo de dispersão apropriado, uma vez que para cada tipo de modelo, diferentes dados de entrada são necessários.



Figura 15 - Modelos de dispersão para cada tipo de liberação.

4.1 Estimativas da Taxa de Emissão

Uma vez avaliado o grau do vazamento, deve-se determinar a quantidade que é liberada para avaliar a extensão da zona afetada. Para tal, deve-se determinar a taxa de emissão. As estimativas dessa taxa e da quantidade total liberada são essenciais como entrada para outros modelos. Segundo Aiche (2000), a taxa de emissão é dependente de vários parâmetros tais como: a área do furo; a pressão dentro e fora do tanque; as propriedades físicas do gás; a temperatura do gás. Sendo assim, fatores como a fase de liberação, o caminho termodinâmico, o diâmetro do orifício de vazamento, a duração, dentre outros, devem ser levados em consideração.

Os modelos da taxa de emissão requerem uma consideração cuidadosa da fase do material liberado que pode ser determinada utilizando diagramas ou dados termodinâmicos, por exemplo, e a definição do tamanho do orifício que é uma entrada primária para o cálculo da

descarga. Além disso, a especificação do ponto final e o caminho termodinâmico utilizado para atingir o ponto final é importante para o desenvolvimento do modelo de origem. Se o fluido inicialmente em repouso é acelerado durante uma liberação e o ponto final é definido como fluido em movimento, então a suposição de um caminho isentrópico é normalmente válida. Se, no entanto, o ponto final for definido como fluido em repouso independentemente de quaisquer acelerações transitórias, então as entalpias iniciais e finais seriam assumidas iguais, não implicando que durante o processo a entalpia seja constante.

Para liberações isentrópicas, um modelo de equilíbrio *flash* pode ser usado para determinar a temperatura final, composição e divisão de fase à pressão ambiente. Claramente, se o percurso permanece na fase gasosa ou líquida, é modelado em conformidade. No entanto, se for encontrada uma alteração de fase, então o fluxo de duas fases pode vir a ser considerado na modelagem da liberação. Um líquido puro irá flashear no seu ponto normal de ebulição, enquanto uma mistura evapora continuamente e com composições variadas no intervalo desde o seu ponto de orvalho até temperaturas de ponto de bolha.

4.1.1 Taxa de Emissão para Gases

Para o caso de vapor superaquecido, as equações relevantes são as equações de fluxo de gás compressível e estas permitem o importante fenômeno de fluxo obstruído (sônico) ou crítico (subsônico). Considere um jato de gás proveniente de uma ruptura no espaço de vapor de um tanque de armazenamento de líquido pressurizado. Quando ocorre a ruptura, a velocidade e o fluxo mássico do fluido de saída dependem da pressão no interior e da pressão no exterior do recipiente.

Quando as pressões não são muito diferentes, o fluxo não é obstruído. No entanto, o gás pode sair da ruptura tão rápido quanto a sua velocidade sónica e em maiores diferenças de pressão existe uma condição "obstruída" na saída. Fluxo obstruído significa simplesmente que o gás está se movendo através do orifício em sua velocidade máxima possível, ou seja, a velocidade local do som no gás (HANNA, 2009).

O critério de pressão para fluxos obstruídos ou críticos ocorrerem, assumindo a existência de um gás ideal através de um pequeno orifício, pode ser expresso pela Equação (4.1).

$$\frac{P}{P_a} \ge \left(\frac{\gamma+1}{2}\right)^{\gamma/\gamma-1} \tag{4.1}$$

Onde,

P = pressão absoluta no reservatório (N.m⁻²);

 P_a = Pressão atmosférica (N.m⁻²);

 γ = Razão de calor específico do gás (C_p/C_v).

À medida que a pressão a montante P diminui, uma taxa máxima é encontrada. Seu máximo ocorre quando a velocidade do gás de descarga atinge a velocidade sônica. Neste ponto, o fluxo torna-se independente da pressão a jusante e é dependente apenas da pressão a montante.

A Equação (4.2) representa o caso sônico (PERRY et al., 1999).

$$G = C_D A_e \left[P \rho_0 \gamma \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$(4.2)$$

Onde,

G = Taxa de emissão (kg.s⁻¹);

 C_D = Coeficiente de descarga para o orifício;

 $A_e =$ Área do orifício de liberação (m²);

 ρ_0 = Densidade do gás no reservatório (kg.m⁻³).

Quando a pressão do tanque diminui abaixo de aproximadamente duas vezes a pressão atmosférica, o fluxo obstruído deixa de ser aplicável e torna-se subcrítico (Equação (4.3)).

$$G = C_D A_e \left(2\rho_0 P \left(\frac{\gamma}{\gamma - 1} \right) \left[\left(\frac{P_a}{P} \right)^{\frac{2}{\gamma}} - \left(\frac{P_a}{P} \right) \frac{\gamma + 1}{\gamma} \right] \right)^{\frac{1}{2}}$$
(4.3)

Segundo Macmillan (1998), a Equação (4.2) para $\gamma = 1.4$, pode ser considerada válida apenas quando a pressão a montante exceder 2 x 10⁵ N.m⁻². Quando isso não ocorre, os efeitos da pressão atmosférica tornam-se significativos e a equação da taxa de liberação de massa passa a ser representada pela Equação (4.4).

$$G = C_D A_e [2\rho_0 (P - P_a)]^{\frac{1}{2}}$$
(4.4)

As equações acima exigem a especificação de um coeficiente de descarga, C_D . Valores para essa constante são fornecidos em API (1996) que recomendam um coeficiente de descarga

de 0,6 para fins de triagem padrão, juntamente com um furo circular. Para uma estimativa conservadora com fluxo máximo, recomenda-se utilizar um valor de 1,0. Estas equações também requerem um valor de γ , a razão da capacidade calorífica, a qual, para gases ideais monoatômicos, $\gamma = 1,67$, para gases diatômicos, $\gamma = 1,4$ e para gases tri atômicos, $\gamma = 1,32$ (AICHE, 2000).

4.1.2 Taxa de Emissão para Líquidos

No caso articular de emissões de líquidos que não sofrem evaporação parcial, a força motriz para a liberação é normalmente a pressão, com a energia de pressão sendo convertida em energia cinética durante a descarga. Dessa forma, a modelagem da saída de líquido através de furos e tubulações visa prever o fluxo mássico em função da queda de pressão.

O modelo da taxa de descarga é baseado no balanço de energia mecânica (Equação (4.5))

$$\int_{P_1}^{P_2} \frac{dP}{\rho} + \Delta\left(\frac{v^2}{2g_c}\right) + g\Delta z + F = -\frac{W_s}{G}$$
(4.5)

onde, g_c , z, F, W_s e G são, respectivamente, constante gravitacional, altura da fonte de liberação, perdas por atrito, trabalho de eixo e fluxo mássico.

Desprezando a velocidade inicial do líquido no recipiente, considerando dois pontos nos quais a altura do fluido permanece a mesma e que não há trabalho de eixo do fluxo (o mesmo não sofre expansão entre os pontos inicial e final hipotéticos), a pressão do líquido na fonte é convertida em energia cinética com o escoamento através do orifício. Parte da energia cinética é perdida devido à fricção, sendo esta contabilizada através de um coeficiente de descarga constante, C₁, definido como:

$$-\frac{\Delta P}{\rho} - F = C_1 \left(-\frac{\Delta P}{\rho}\right) \tag{4.6}$$

Rearranjando a Equação (4.5) e substituindo a informação dada pela Equação (4.6), temse:

$$v = C_1 \sqrt{g_c} \sqrt{\frac{\Delta P}{\rho}}$$
(4.8)

Onde, $C_D = C_1$, resultando na taxa de fluxo mássico através do orifício de área A_e,

$$G = C_D A_e \left[2\rho_L (P - P_a) \right]^{\frac{1}{2}}$$
(4.9)

 $\operatorname{Com} P = P_h + P_{aL} e P_h = \rho_{L.g.} h_L \text{ onde,}$

g = Aceleração da gravidade m.s⁻²; h_L = Altura do líquido (m); P_h = Pressão hidráulica do líquido (N.m⁻²); P_{aL} = Pressão externa acima do líquido (N.m⁻²); ρ_L = Densidade do líquido (kg.m⁻³).

O CCPS (1996) aponta que além da taxa de liberação de um jato de líquido puro ser proporcional a quantidade de pressão sobre o líquido no tanque, ela depende também da gravidade devido à altura do fluxo de líquido através de uma pequena fissura. A correlação geral para a taxa mássica de emissão de líquido a partir de um orifício num tanque é apresentada na Equação (4.10) (CROWL e LOUVAR, 2002).

$$G = C_D A_e \rho_L \left[2 \left(\frac{P - P_a}{\rho_L} \right) + 2g\Delta h_L \right]^{\frac{1}{2}}$$
(4.10)

Esta equação é utilizada caso a altura seja considerada no balanço do nível de liquido e implica em assumir que haverá uma diminuição da quantidade de líquido no reservatório, caso contrário, esta equação é reduzida à Equação (4.9).

4.1.3 Taxa de Emissão para Liberações Bifásicas

Dois algoritmos diferentes são usados para o fluxo pressurizado de duas fases, dependendo se o vazamento é por um simples orifício no tanque ou está no final de um curto comprimento de tubo. Uma forma simplificada do modelo de não equilíbrio homogêneo foi desenvolvida por Fauske e Epstein (1988) para calcular a taxa de liberação de uma mistura de duas fases de um tubo ou ducto curto. O modelo de equilíbrio homogêneo de Fauske e Epstein demonstrou predizer taxas de liberação de duas fases através de tubos ou dutos com comprimento entre 0 e 10 cm.

As condições de equilíbrio em termos de temperatura e/ou velocidade são geralmente necessárias para relacionar o fluxo mássico para fluxos que flasheiam com as condições de saída locais. A montante desta região, o processo de flasheamento aproxima-se das condições de equilíbrio se o tubo tiver um comprimento suficiente. Nesse contexto, Fauske (1985) verifica, a partir de observações experimentais, que para sistemas onde o fluxo é a variável dependente, este comprimento parece ser da ordem de 0,1 m. Para tubos de comprimentos

inferiores a 0,1m (o regime de não equilíbrio), o fenômeno de flasheamento aumenta fortemente com o decréscimo do comprimento, aproximando-se do fluxo de líquido à medida que o comprimento se aproxima de zero. Para os comprimentos de fluxo maiores que cerca de 0,1 m (regime de equilíbrio) o fluxo se aproxima de um valor assintótico onde o fluxo é relativamente insensível ao aumento no parâmetro de comprimento. Fauske (1985) ainda conclui que um critério de comprimento simples da ordem de 0,1 m parece caracterizar a exigência de tempo de residência para ambas as fases, cobrindo grandes variações de diâmetro e pressão de armazenamento, incluindo diferentes propriedades dos fluidos.

As liberações bifásicas podem ser reativas ou não reativas. O caso não reativo envolve o *flash* de líquidos à medida que são liberados. Nesse caso, são necessárias duas considerações especiais. Se o líquido é sub-arrefecido, o fluxo de descarga irá obstruir a sua pressão de vapor à temperatura ambiente. Se o líquido é armazenado sob a sua própria pressão de vapor, uma análise mais detalhada é necessária (FAUSKE e EPSTEIN, 1988).

Fausk e Epstein (1988) derivaram expressões analíticas relativamente simples para o fluxo de duas fases obstruído. Para condições de sub-arrefecimento, onde a pressão de armazenamento é substancialmente maior do que a pressão de vapor correspondente à temperatura de armazenamento, sugere-se uma equação baseada na equação de Bernoulli, conforme a Equação (4.11).

$$G = C_D \left[2\rho_L \left(P - P_v(T_0) \right) \right]^{\frac{1}{2}}$$
(4.11)

Onde $P_{\nu}(T_0)$ é a pressão de vapor da substância líquida à temperatura de armazenamento.

Para condições de líquido saturado, onde $P = P_v(T_0)$, Fauske e Epstein (1988) sugerem que a taxa de liberação é obtida a partir da Equação (4.12).

$$G = \frac{fL_v}{v_{\lg}\sqrt{TC_{pL}}}$$
(4.12)

Onde,

f = Fator de atrito;

 L_V = Calor latente de vaporização (J.kg⁻¹);

 v_{lg} = Diferença entre o volume específico do líquido e do gás (m³.kg⁻¹);

 C_{pL} = Capacidade calorífica da fase líquida (J.kg⁻¹K⁻¹).

O fator de atrito é responsável pela dissipação devido ao atrito, com base na relação comprimento / diâmetro do tubo de saída (l/d_p) . Fausk e Epstein (1988) sugerem os valores apresentados na Tabela 4 com base nessa razão.

f	l/dp
1,00	0
0,85	50
0,75	100
0,65	200
0,55	400

Tabela 4 - Valores para o fator de atrito com base na relação comprimento/diâmetro do tubo de saída.

Para a região de transição de condições de armazenamento sub-arrefecido para saturado, a equação sugerida (Equação (4.13)) é resultante da combinação das equações (4.11) e (4.12).

$$G = C_D \left[2\rho_L (P - P_V(T_0)) + \frac{fH_V}{v_{\lg}\sqrt{TC_{pL}}} \right]^{\frac{1}{2}}$$
(4.13)

Bosch (2005) afirma que para fluxos bifásicos as relações padrão para fluxo de líquido através de orifícios podem ser aplicadas. Contudo, assume-se que o fluido tem uma densidade em função da fração de vapor em massa, conforme a Equação (4.14).

$$G = C_D A \left[2\rho \left(P - P_a \right) \right]^{\frac{1}{2}}$$
(4.14)

Com,

$$\rho = \frac{1}{\left[\frac{\Phi_m}{\rho_V} + \frac{(1 - \Phi_m)}{\rho_L}\right]} \quad (\text{kg.m}^{-3})$$
(4.15)

 Φ_m = Fração mássica de vapor no fluxo bifásico;

 ρ = Densidade média do fluido.

Como observado, todos os modelos apresentados requerem o uso do coeficiente de descarga (C_D). De acordo com Lees (1996), o coeficiente de descarga poderá ter seu valor estabelecido de acordo com as seguintes condições:

1. Reynolds acima de $30.000 - C_D = 0.61$;

- 2. Bocal arredondado $C_D \cong 1$;
- Liberação através de seções curtas de tubulações com razão entre comprimento/diâmetro não menor que 3 - C_D 0.81;
- Situações que não se pode determinar é aconselhável que o valor seja igual a 1, maximizando o resultado para obtenção de um resultado conservativo.

4.2 Modelo de Equilíbrio Homogêneo (HEM)

O Modelo de Equilíbrio Homogêneo é muito utilizado para descrever o comportamento do jato resultante de uma liberação bifásica. Em Kukkonen et al. (1994), por exemplo, a abordagem HEM foi utilizada para calcular a dispersão de jatos bifásicos de amônia.

Os processos de fluxo multifásico são normalmente governados por desvios do equilíbrio mecânico e térmico entre as fases. Esses efeitos de não equilíbrio são resultado das diferenças geralmente grandes no estado e propriedades de transporte para as duas fases e as taxas finitas para os processos de transferência interfacial. A suposição de fluxo homogêneo e equilíbrio térmico entre as fases representa uma grande simplificação e, portanto, pode ser considerada apenas como uma aproximação grosseira do processo de fluxo real. No entanto, modelos de fluxo bifásicos homogêneos podem ser vistos como casos limitantes especiais para abordagens mais detalhadas e, por isso, são muito úteis para a compreensão de condições mais complexas (STÄDTKE, 2006).

O HEM é uma abordagem simplificada para fluxos bifásicos onde se supõe que a velocidade, temperatura e pressão entre as fases ou componentes são iguais. Isso implica que o transporte de calor e massa entre elas é infinitamente rápido. Esta abordagem distingue as duas fases apenas pelo seu volume (ou massa) num determinado volume de mistura. A abordagem HEM tem duas vantagens principais:

- Requer pouca informação sobre o termo de origem;
- As equações de conservação são semelhantes às equações de conservação para fluxo monofásico.

Dada a igualdade térmica, cinemática e de pressão entre as fases, as equações de conservação de massa, momento e energia para a evolução do fluxo de duas fases em equilíbrio homogêneo, podem ser escritas a partir das equações de Euler para fluxo monofásico. Tais equações podem ser verificadas na Tabela 5.

Fenômeno de Transferência	Equação de Conservação
Massa	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho A) + \operatorname{div}(\rho A u) = 0$
Momento	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Au) + \operatorname{div}(\rho Au \otimes u) + \nabla P = 0$
Energia	$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho A E \right] + \operatorname{div} \left(\rho A u H' \right) = 0$

Tabela 5 - Equações de conservação de massa, momento e energia para fluxo bifásico.

Nestas equações, $E = e + \frac{|u|^2}{2}$ denota a energia total, $H' = H + \frac{|u|^2}{2}$ a entalpia total, $\rho \in u$ a densidade ponderada e a velocidade da mistura. A densidade de mistura é obtida a partir da Equação (4.15) e a entalpia, entropia e energia de mistura são definidas conforme a Equação (4.16).

$$H = H_V \Phi_m + H_L (1 - \Phi_m)$$

$$S = S_V \Phi_m + S_L (1 - \Phi_m)$$

$$e = e_V \Phi_m + e_L (1 - \Phi_m)$$
(4.16)

Devido ao pressuposto de equilíbrio completo entre as fases, todas as variáveis de estado das são funções apenas da pressão e da temperatura (STÄDTKE, 2006).

$$\left[\rho_{V},\rho_{L},u_{V},u_{L},S_{V},S_{L}\right] = f\left(P,T\right) \tag{4.17}$$

Para as quantidades da mistura, a fração mássica de vapor aparece como um terceiro parâmetro independente.

$$\left[\rho, e, H, S\right] = f\left(P, T, \Phi_m\right) \tag{4.18}$$

Este é um modelo bem estabelecido e amplamente utilizado, fornecendo previsões razoavelmente boas para a velocidade mássica sob condições em que o tubo é suficientemente longo para que o equilíbrio seja estabelecido e o fluxo padrão seja tal que suprima o movimento relativo. Para tubos curtos onde o tempo de diminuição é insuficiente, o fluxo pode ser errôneo por um fator de cerca de 5. Para tubos mais longos com um padrão de fluxo que permite uma grande velocidade relativa, tal como fluxo anular, o fator de erro tende a ser um pouco menor que 2.

CAPÍTULO 5

5. MODELAGEM

Neste trabalho foram consideradas três situações de vazamento as quais envolvem uma liberação de líquido que não evapora e as demais, liberações de líquidos flasheados e liberados como *spray*. A modelagem descrita a seguir foi implementada em Matlab® e utilizada para o cálculo dessas situações. Algumas já previamente apresentadas e discutidas na literatura.

A modelagem de líquido que não evapora foi realizada com base em Mcmillan (1998) e a modelagem para vazamento bifásico foi realizada principalmente, a partir dos estudos realizados por Fausk e Epstein (1988) e das correlações apresentadas em Bosch (2005) e Kukkonen (1990), baseadas no Modelo de Equilíbrio Homogêneo (MEH ou HEM-*Homogeneous Equilibrium Model*).

Dado que o modelo para liberação bifásica prevê apenas a extensão do jato bifásico utilizou-se a abordagem proposta por Long *apud* Lees (1996) para jato turbulento subsônico, uma vez que esta pode ser atribuída a nuvem de vapor resultante da evaporação das gotas. A extensão total, desde o orifício até o LEL, é obtida somando-se ambas as distâncias. Sendo assim, fez-se uso de um código em Matlab® para liberações de gás, previamente já implementado, para obter o perfil de concentração da nuvem, bem como a extensão desde o fim da região final do jato bifásico até o LEL, acoplando o resultado ao obtido para o jato bifásico.

As situações simuladas consistem em uma liberação de acetona líquida sub-resfriada e liberações bifásicas de butano e propano. Estes cenários serão detalhados mais adiante, neste capítulo. Para este último caso, o resultado foi comparado ao obtido em CFD, nas mesmas condições, cuja simulação já havia sido previamente realizada por um dos componentes do Laboratório de Experimentação Numérica (LENP) da Universidade Federal de Campina Grande (UFCG), local onde este trabalho foi desenvolvido.

5.1 Propriedades Físicas e Termodinâmicas

As correlações empregadas para determinação das propriedades físicas e termodinâmicas necessárias para obtenção de alguns parâmetros da modelagem são exibidas na

Tabela 13 do Anexo D. As correlações possuem constantes cujos valores variam a depender do componente da liberação. Tais constantes encontram-se na Tabela 11 do Anexo C.

5.2 Modelagem de Liberação de Líquido sem Flash

Como já mencionado, nesta situação de vazamento o líquido não evapora e formará uma poça. A modelagem descrita aqui segue o modelo definido em Mcmillan (1998). Nele, a taxa de liberação é obtida pela Equação (4.9) considerando um coeficiente de descarga igual a 0,8. Determina-se então a velocidade de emissão do jato líquido a partir da Equação (4.8).

O jato será liberado de forma que poderá ser direcionado para cima ou para baixo, formando um ângulo, ϕ , com a horizontal, e a poça será formada há uma distância, *d*, do orifício. Essa distância é dependente da velocidade de vazamento e do ângulo e pode ser obtida conforme a Equação (5.1).

$$d = v\cos\phi \left[\frac{(\sqrt{2gh + v^2sen^2\phi}) + vsen\phi}{g}\right]$$
(5.1)

Essa equação pode ser aplicada para jatos direcionados acima da horizontal ou na horizontal (onde $\phi = 0$). Nos casos de jatos liberados em um ângulo abaixo da horizontal este é redefinido para um ângulo ϕ ', onde ϕ ' = 360 – ϕ e substituído na mesma equação.

A poça formada irá evaporar e dessa forma é necessário analisar a massa de vapor que está sendo liberada. De um modo geral, pode-se afirmar que a taxa de evaporação G_g (kg.s⁻¹) é função da pressão de vapor, da área da poça, das condições atmosféricas e da pressão parcial do vapor como uma fração da pressão atmosférica (Equação (5.2)) (AICHE, 1996).

$$G_g = A_p k_g P_v WM$$
(5.2)

onde, k_g , A_p , P_v , WM, são, respectivamente, coeficiente de transferência de massa ($k_g = 2x10^{-3}/\text{Re}^{0.2}$), área da poça, pressão de vapor do componente à temperatura de liberação e peso molecular.

Ainda de acordo com Mcmillan (1998), após algumas considerações, a taxa de evaporação da gota pode ser obtida pela seguinte equação:

$$G_g = 2 \times 10^{-3} \cdot \frac{A_p \cdot P_v \cdot WM}{R^{0,2}}$$
(5.3)

Caso não haja alguma contenção física, a poça irá aumentar até que a taxa de evaporação na superfície seja igual a taxa de liberação através do orifício. Desse modo, combinando as equações (5.3) e (4.9) para um coeficiente de descarga de 0.8, e rearranjando, a área da poça será determinada de acordo com a Equação (5.4).

$$A_{p} = 5,56 \times 10^{2} .. A_{e} \sqrt{\rho \Delta P} . \text{Re}^{0.2} .P_{v} .WM$$
(5.4)

Onde A_e é a área do orifício de liberação.

Re^{0,2} é obtido a partir do ajuste do número de Reynolds, conforme a Figura 16(a), encontrada na literatura. A Figura 16(b) apresenta a regressão realizada para automatização do cálculo.



Figura 16 - Relação entre o número de Reynolds e a área da poça.
A área da poça pode agora ser obtida pela Equação (5.5) e a taxa de evaporação pela Equação (5.6).

$$A_{p} = \left[\frac{6088,44A_{e}\sqrt{\rho_{L}(P_{0} - P_{a})}}{P_{v}MW}\right]^{1,116}$$
(5.5)

$$G_g = 1,856 \times 10^{-4} A_p^{0.896} P_v MW$$
(5.6)

O raio da poça é obtido a partir da premissa de que esta é uniformemente circular. O passo seguinte é determinar a extensão a partir da borda da poça até o LEL (Equação (5.7)). A extensão total devido a liberação será então a soma da distância de alcance do jato (Equação (5.1)) com o raio da poça e a Equação (5.7) como pode ser observado na Figura 17.

$$X = \left[\frac{(5,382 \times 10^{-3} A_p^{0.396} P_v T_a)}{LEL_g}\right]^{1,14}$$
(5.7)

Figura 17 - Esquema de localização da extensão da área classificada.



Fonte: Autor.

O procedimento de cálculo descrito acima é simplificado na Figura 18.



Figura 18 - Algoritmo para o tratamento de jato de líquido sem flash.



5.3 Modelagem Para Liberação Bifásica

5.3.1 Jato Bifásico

O jato bifásico resultante das liberações analisadas possui a configuração exibida na Figura 19. Estas ocorrem a partir do rompimento de uma tubulação conectada a um vaso de armazenamento. Considera-se que tal rompimento se dá à 10cm da conexão tubo/vaso, dessa forma, o modelo de equilíbrio homogêneo pode ser aplicado.



Figura 19 - Esquema do jato bifásico tratado para os casos de liberação bifásica.

Fonte: Autor.

Os pontos e, f e j na figura referem-se as condições do jato no orifício de saída, no fim da região de expansão e após a evaporação total das gotículas, respectivamente

5.3.2 Estimativa da Pressão e Temperatura na saída

É possível estimar a pressão e temperatura na saída do orifício ($P_e \ e \ T_e$) a partir das considerações para fluxo bifásico em tubos. Neste caso, o fluxo é admitido como sendo crítico. A Pressão na saída é obtida maximizando o lado direito da Equação (5.8) em relação à P_e . Esta correlação é descrita no Anexo B (KUKKONEN, 1990).

$$\left(\frac{q_s(P_e)}{A_p}\right)^2 = \frac{(P_0 - P_e) + \frac{g}{v_L} \left(\Delta h_{L,2} + \beta_r \times \Delta h_{L,3}\right)}{\left\{v_e(P_e) \times \left[1 + \frac{\left(l_p \times f_D \times \alpha_r\right)}{2d_p} + \sum \left(\frac{K_i \tau_i}{2}\right)\right] - \frac{v_{L,e}(P_e)}{C_D} \left(1 - \frac{1}{2C_D}\right)\right\}}$$
(5.8)

Onde f_D é o fator de atrito, l_p e d_p o comprimento e diâmetro do tubo respectivamente. K_i é o coeficiente de resistência, $\tau_i = \frac{v_i}{v_e}$, v_e , $v_{L,e}$ e v_i são o volume específico do fluido e do líquido na saída e no local de resistência do tubo, respectivamente. O fator de atrito pode ser obtido a partir da correlação explícita de Chen (1979) se o Reynolds estiver no intervalo de $4000 < \text{Re} < 10^7$.

$$\frac{1}{\sqrt{f_D}} = -2\log\left\{\frac{\varepsilon}{d_p} \times \frac{1}{C_1} - 2\frac{C_2}{\text{Re}} \times \log\left[\left(\frac{\varepsilon}{d_p}\right)^{C_3} \frac{1}{C_4} + \frac{C_5}{\text{Re}^{C_6}}\right]\right\}$$
(5.9)

Onde C₁=3,7065, C₂=2,5226, C₃=1,1098, C₄=2,8257, C₅=5,8506, C₆=0,8981

Admite-se que na saída o fluido está saturado, sendo assim a temperatura é estimada utilizando-se a equação de Antoine.

5.3.3 Modelagem do Jato Bifásico

A modelagem do jato bifásico é separada em quatro etapas as quais são referentes às condições do jato na região de expansão após ocorrer o *flash* (Etapa 1), ao diâmetro das gotas resultantes deste fenômeno (Etapa 2), o cálculo da taxa de evaporação das bem como a determinação da ocorrência de *rainout* (Etapa 3), e a determinação da concentração do jato após a evaporação de todas as gotículas (Etapa 4).

Os efeitos associados com a despressurização na liberação à pressão atmosférica são descritos primeiramente e em seguida a possibilidade das gotículas caírem no solo (formando uma poça que se evapora). Para tal, é necessário determinar o tamanho das gotículas e a evaporação de uma gota que cai através do ar. Finalmente, descreve-se os efeitos da evaporação das gotículas restantes no ar, levando a uma densidade efetiva e a concentração de vapor/ar que se dispersa na atmosfera.

Na fase de arrastamento, a taxa de evaporação das gotículas no jato é dominada pela quantidade de ar arrastado e a quantidade de calor trazida para o jato pelo ar. O cálculo da evaporação das gotículas no jato pode ser feito a partir do equilíbrio entálpico em qualquer ponto no jato. Webber e Brighton (1989) calculam a temperatura depois do arrastamento através da avaliação das mudanças de entalpia quando uma certa quantidade de ar húmido em T_a (temperatura ambiente) é misturada com o produto químico nas condições de *flash* (Φ_f , T_b). A variação de entalpia líquida é zero conforme a Equação (5.10).

$$0 = \Delta H = \Delta H_{produto} + \Delta H_{arseco} + \Delta H_{vapord`água}$$
(5.10)

As mudanças de entalpia individuais incluem a alteração da temperatura, tanto de líquido quanto de vapor, e o calor de evaporação e/ou de condensação. Se o produto químico não formar uma solução ideal em água, um termo ΔH_{mixing} deve ser adicionado ao saldo entálpico da Equação (5.10), para ter em conta o fato de que os produtos químicos que se dissolvem em água produzem calor. Também, as pressões de vapor saturado da água e do produto químico mudam e tornam-se dependentes da fração de mistura na gota. O procedimento para determinar as variações de entalpia pode ser observado no Anexo A (SKOGESTAD, 2009).

5.3.3.1 Cálculo das condições no jato depois do flash - Etapa 1

Para a determinação do comportamento do jato na região de expansão (ponto f – Figura 19) é necessário saber as condições nas quais o vazamento ocorre. No caso de saída através de um orifício na parede de um vaso, as condições de saída são idênticas às condições no recipiente. Em caso de saída de uma tubulação as condições de saída referem-se às condições no tubo antes da abertura de escoamento.

Nesta etapa, inicialmente é necessário determinar a densidade na saída ρ_e do orifício obtida conforme a Equação D.1 do Anexo D. Neste caso, a densidade da fase vapor $\rho_{V,e}$ é calculada a partir da equação para gases ideais à P_e e T_e e a densidade da fase líquida $\rho_{L,e}$ é obtida pela Equação D.2 da Tabela 13 do Anexo D, com T = T_e .

Após a saída, o fluxo sofrerá uma despressurização e o líquido vaporiza até que a mistura de duas fases esteja na temperatura de ebulição. Dessa forma, deve-se determinar quanto de líquido é vaporizado. Essa fração pode ser determinada utilizando-se a Equação (5.11).

$$\Phi_{m,e} = Cp_{L,e} \left(\frac{T_e - T_b}{L_{v,e}} \right)$$
(5.11)

No final da zona de expansão, o jato está na pressão atmosférica. Assim, o líquido, que está em equilíbrio termodinâmico com seu vapor, está na sua temperatura de ebulição. A partir da conservação de momento, de massa e da conservação de energia total, a velocidade do jato (Equação (5.12)) e a qualidade (Equação (5.13)), depois do flash, podem ser calculadas. Por fim, determina-se a densidade média do jato depois do flash para então obter-se o aumento da seção transversal A_f (Equação 5.(14)) e o raio b_f admitindo que a seção transversal do jato tem um formato circular.

$$u_{f} = \frac{(P_{e} - P_{a})A_{e}}{q_{s,e}} + u_{e}$$
(5.12)

$$\Phi_{m,f} = I - \frac{H_{V,f} - H_{V,e} + (I - \Phi_{m,e})L_{V,e} + \frac{I}{2}(u_f^2 - u_e^2)}{L_{V,f}}$$
(5.13)

$$A_f = \frac{\rho_e u_e}{\rho_f u_f} A_e \tag{5.14}$$

5.3.3.2 Cálculo do diâmetro das gotas depois do flash – Etapa 2

A fim de estimar a possibilidade de se ocorrer a chuva ou *rainout* (gotículas do jato caírem no chão e não contribuírem diretamente para a quantidade de poluente no jato), é necessário calcular o diâmetro das gotículas depois do *flash*. Em alguns casos será necessário a utilização de uma constante relacionada ao tamanho da gota (C_{ds}). Na literatura, essa constante varia entre 10 e 20, porém, neste trabalho é considerado um valor igual a 15.

O diâmetro das gotas depende da velocidade do jato, tamanho do jato, viscosidade e tensão superficial. Portanto, faz-se uso de dois números adimensionais, o número de Reynolds (Re_f) e o número de Weber (We_f). O número de Reynolds caracteriza o equilíbrio entre força e viscosidade cinemática (v), o número de Weber caracteriza o equilíbrio entre a quantidade de movimento e a tensão superficial (σ_s). Neste caso, o Reynolds e o número de Weber são calculados em função do raio e velocidade do jato no fim da região de expansão e da densidade da fase líquida também neste ponto, conforme Equações (5.15).

$$Re_{f} = \frac{2b_{f}u_{f}}{\upsilon_{l}} \quad , \quad We_{f} = \frac{2b_{f}u_{f}^{2}\rho_{L,f}}{\sigma_{s}}$$
(5.15)

O diâmetro é calculado para uma única gota e a correlação utilizada irá depender da temperatura de liberação e dos números adimensionais já mencionados. Dessa forma, se $We_f < Re_f^{-0.45} \times 10^6$ e $T_e < 1.11T_B$, a correlação aplicada será a Equação (5.16), caso contrário deve-se aplicar a Equação (5.17), a qual é derivada da equação do número de Weber.

$$d_{d} = 3,78 b_{f} \sqrt{\left(1 + 3 \frac{W e_{f}^{\frac{1}{2}}}{\operatorname{Re}_{f}}\right)}$$
(5.16)

$$d_{d} = C_{ds} \frac{\sigma_{s}}{u_{f}^{2} \rho_{a}}$$
(5.17)

5.3.3.3 Evaporação das gotas e ocorrência de rainout – Etapa 3

Por definição o que não chove deve permanecer dentro do jato e ser subsequentemente evaporado nessas condições. A maioria dos modelos de jato podem adaptar este processo de evaporação quer pela massa devido ao arrastamento ou considerando a evaporação de gotículas individuais. Neste último caso, é necessário o conhecimento do diâmetro médio das gotas de líquido ou a distribuição real do tamanho das partículas.

No entanto, a abordagem comumente tomada é determinar um diâmetro médio de partícula, assumir uma distribuição de diâmetro de partícula e, em seguida, acompanhar o destino de partículas dentro do jato a jusante da ruptura, com algumas das partículas que chovem e algumas que evaporam.

Nesta etapa, realiza-se inicialmente uma estimativa para saber se as gotículas provenientes do flasheamento podem atingir o chão. Se este for o caso, a fração mássica total que irá cair é calculada. Assume-se que as gotículas tem o mesmo diâmetro, a evolução do diâmetro único devido à evaporação das gotículas é, portanto, considerada representativa de todas as gotículas.

A Estimativa da gota cair no chão requer o cálculo da taxa de evaporação de gotículas individuais. A evaporação é restrita por um fluxo de calor do ar ambiente para a gota e pelo fluxo de massa da superfície da gotícula para o ar ambiente. Portanto, o problema depende da difusão de massa e convecção de calor em ar. Sendo assim, os números adimensionais relevantes são o número de Reynolds (Re_d), com base na velocidade relativa da gota através do ar (Equação (5.18)), o número de Schmidt (Sc) que representa a relação de viscosidade e difusão em massa, e o número de Prandtl (Pr) que representa a relação entre a viscosidade e difusão de calor (Equação (5.19)).

$$u_d = \frac{\rho_{L,f} g}{18 v_a \rho_a} d_d^2 \tag{5.18}$$

$$\operatorname{Re}_{d} = \frac{u_{d}d_{d}}{\upsilon_{a}} \qquad Sc = \frac{\upsilon_{a}}{D} \qquad \operatorname{Pr} = \frac{C_{p}\rho_{a}\upsilon_{a}}{\lambda} \qquad (5.19)$$

~

Onde, u_d é a velocidade de queda livre da gota (m.s⁻¹), d_d o diâmetro da gota (m), v_a a viscosidade cinemática do ar (m².s⁻¹), D o coeficiente de difusão (m².s⁻¹), C_p o calor específico à pressão constante (J.kg⁻¹.K⁻¹), ρ_a a densidade do ar (kg.m⁻³) e λ a condutividade térmica (J.m⁻¹.s⁻¹.K⁻¹).

Agora, a diferença de temperatura entre o ar ambiente e as gotículas pode ser calculada. Esta é chamada de temperatura de depressão e mantém o fluxo de calor requerido a partir do ar para a gota, a fim de permitir a evaporação e é obtida a partir da Equação (5.20).

$$T_{d} = T_{a} - \frac{L_{v,d}k_{B}\rho_{L,f}\left(1+0.28Re_{d}^{\frac{1}{2}}Sc^{\frac{1}{3}}\right)}{4\lambda\left(1+0.28Re_{d}^{\frac{1}{2}}Pr^{\frac{1}{3}}\right)}$$
(5.20)

Onde $k_B = -\frac{4\mu_i DP_a}{\rho_{L,f} RT_a} \ln\left(1 - \frac{P_s(T_d)}{P_a}\right), \mu_i \text{ é o peso molecular do componente i, } L_{v,d} \text{ é o}$

calor latente de vaporização da gota à T_d e R a constante dos gases ideais.

Após, é possível obter o diâmetro crítico máximo aproximado que uma gota pode ter sem que a mesma atinja o chão, estando ela a uma altura de liberação h_s acima do solo. A chuva só ocorrerá se o tamanho da gota depois do flash d_d for maior que a gota de chuva de tamanho máxima d_M . Se d_d é menor que d_M , e Re_d (com base em d_M) < 4, pode-se seguir diretamente para a etapa 4. O diâmetro máximo é obtido segundo a Equação (5.21).

$$d_{M} = 2 \left\{ \frac{9\rho_{a}\upsilon_{a}k_{B}h_{S}}{2\rho_{L,f}g} \left[1 - 0,204 \, Sc^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\rho_{L,f}g}{18\rho_{a}\upsilon_{a}^{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{72\rho_{a}\upsilon_{a}k_{B}h_{S}}{\rho_{L,f}g} \right)^{\frac{3}{8}} \right]^{-1} \right\}^{\frac{1}{4}}$$
(5.21)

Se d_d é maior que d_M e Re_d > 4, a massa total que irá cair no chão e a massa que permanece no ar precisam ser calculadas. Portanto, uma integração numérica da evolução do diâmetro da gotícula que evapora enquanto cai para baixo precisa ser realizada. A evolução do diâmetro d_d(t) pode ser calculada a partir da equação diferencial apresentada na Equação (5.22).

$$\frac{d}{dt}d_{d} = -\frac{k_{B}}{d_{d}}\left(1 + 0.28 \operatorname{Re}_{d}^{\frac{1}{2}} \operatorname{Sc}^{\frac{1}{3}}\right)$$
(5.22)

A altura acima do solo da gotícula é calculada integrando a velocidade u_d (Equação (5.23)), que também varia com o tempo. Supõe-se que a liberação é horizontal, e que não existe

componente de velocidade vertical inicial. A integração é realizada até que a gota atinja o solo, ou seja, $h(t_0) = 0$.

$$u_d = \frac{dh}{dt} \rightarrow h_s = h(t_0) - \int_0^{t_0} u_d dt$$
(5.23)

Ao comparar o tamanho da gota d₀ quando atinge o solo com o tamanho da gota inicial depois do flash, d_d, a fração mássica evaporada enquanto a gota cai pode ser calculada. Esta, por sua vez, conduzirá a massa líquida liberada para o ar pelo jato (Equação (5.24)). Este último processo conduz a um arrefecimento do ar arrastado na nuvem de vapor/aerossol e requer a redefinição da qualidade ($\Phi_{m,f,rainout}$) e da área de seção transversal depois do flash ($A_{f,rainout}$), em caso de ocorrência de chuva. Ainda neste último caso, os parâmetros $\Phi_{m,f}$, A_f, e q_{S,e} devem ser substituídos por $\Phi_{m,f,rainout}$, A_{f,rainout}, e q_{S,nett,air} na próxima etapa.

$$q_{s,nettair} = \Phi_{m,f} q_{s,e} + (1 - \Phi_{m,f}) \left[1 - \left(\frac{d_0}{d_d} \right)^3 \right] q_{s,e}$$
(5.24)

$$\Phi_{m,f,rainout} = \frac{\Phi_{m,f}}{\Phi_{m,f} + (1 - \Phi_{m,f}) \left[1 - \left(\frac{d_0}{d_d}\right)^3 \right]}$$
(5.25)

$$A_{f,rainout} = A_f \frac{q_{s,nettair}}{q_{s,e}}$$
(5.26)

5.3.3.4 Cálculo das condições no jato após a evaporação de todas as gotículas - Etapa 4

A evolução de um jato de duas fases em termos de ar arrastado, largura, e queda de concentração e velocidade é a mesma que a evolução de jatos monofásicos. Esta etapa apresenta a técnica para calcular o arrefecimento do jato de fase única após todas as gotículas terem evaporado. As equações apresentadas a seguir foram obtidas conforme o Apêndice deste trabalho.

A concentração no jato (c_j) correspondente à quantidade de ar que será arrastada para o jato a fim de evaporar todos os aerossóis e tem que ser calculada de forma iterativa a partir do balanço de entalpia. Como visto anteriormente, a variação total na entalpia devido à mudança de temperatura, evaporação de aerossol ou condensação da humidade ambiente, precisa ser zero.

$$c_{j} = \frac{P_{v}(T_{j})T_{a}}{P_{a}T_{j}}.$$
(5.27)

Para o cálculo da variação de entalpia do produto químico liberado desde o flash (ΔH_{ch}) pela Equação (5.28), é necessário determinar a fração molar do vapor no jato c_j que é igual à pressão parcial de vapor. Enquanto as gotas estão presentes até o momento em que todo o líquido tenha evaporado, a pressão de vapor parcial é igual à pressão de saturação na temperatura do jato (T_j). Se todo aerossol líquido se evaporar, a qualidade ou a fração mássica de vapor $\Phi_{m, j}$ é zero.

$$\Delta H_{ch} = c_j C p_{ch}^V (T_f - T_j) \Phi_{m,f} + c_j (1 - \Phi_{m,f}) \left[\overline{C p}_{ch}^L (T_f - T_j) - L_{ch}(T_j) \right]$$
(5.28)

As mudanças de entalpia do ar dependem da humidade do ar, sendo assim, as razões molares em base seca c_w (avaliada em T_a) e c_{wv} (avaliada em T_j) são dadas pelas Equações (5.29) e (5.30), respectivamente. A razão molar c_w representa a relação entre o vapor de água que entra no jato devido ao arraste e a razão molar c_{wv} representa a relação entre o vapor de água presente no jato após todas as gotas terem evaporado, ambas obtidas em relação a quantidade, em mols, de ar seco.

$$c_{w} = \frac{RH_{a}P_{w}^{0}(T_{a})}{\binom{R}{\mu_{da}}T_{a}\rho_{da}}$$
(5.29)

Onde, RH_a é a umidade relativa do ambiente, $P_w^0(T_a)$ a pressão de vapor da água à Ta, R é a constante dos gases ideais (J.mol⁻¹.K⁻¹), μ_{da} o Peso molecular do ar seco (kg.mol⁻¹) e ρ_{da} a densidade do ar seco (kg.m⁻³).

$$c_{wv} = \frac{T_a P_w^0(T_j)}{RH_a P_w^0(T_a) T_j} c_w$$
(5.30)

onde $P_w^0(T_j)$ é a pressão de vapor da água à T_j.

Depois de o ar no jato ser arrefecido até a temperatura Tj, parte do vapor de água pode condensar-se, assim, é necessário determinar a razão molar de vapor remanescente. A variação de entalpia da água arrastada com o ar ($\Delta H_{watervapour}$) e a variação de entalpia do ar seco arrastado (ΔH_{dryair}), podem agora ser determinadas pelas Equações (5.31) e (5.32).

$$\Delta H_{wv} = c_{wv} \int_{T_j}^{T_a} C p_{wv}^V dT + (c_w - c_{wv}) L_{w,j}$$
(5.31)

$$\Delta H_{da} = \int_{T_j}^{T_a} C p_a dT \tag{5.32}$$

A situação no jato após a evaporação completa das gotas do material liberado é relevante a fim de calcular a flutuabilidade total liberada para o ar e a densidade da fase vapor no jato (ρ_{jd}). Esta é calculada a partir da lei dos gases ideais à P_a e T_j. A fim de explicar o vapor de água condensado, calcula-se a razão molar de água líquida (c_{jL}) para então determinar a densidade do jato (ρ_i) a partir da Equação (5.33).

$$\rho_{j} = \frac{1 + c_{jL}}{\frac{1}{\rho_{v}} + \frac{c_{jL}}{\rho_{l}}}$$
(5.33)

Com
$$c_{jL} = (c_W - c_W) \frac{\mu_W}{\mu_{jd}}$$
 e $\mu_{jd} = c_j \mu_{ch} + \mu_a + c_W \mu_W$, onde μ_W , μ_{jd} e μ_{ch} são

respectivamente a massa molar da água, da mistura de vapor e do componente química.

Pode-se definir uma fonte equivalente de fase única a ser usada para qualquer modelo de jato ou por um modelo de dispersão de velocidade uniformemente distribuída u_j (Equação (5.34)), através de uma área A_j, O algoritmo utilizado para implementação bem como todas as equações podem ser observadas na Figura 20.

$$u_{j} = \frac{u_{f}}{\left(1 + \frac{1}{c_{j}\mu_{ch}}(\mu_{da} + c_{w}\mu_{w})\right)}$$
(5.34)



Figura 20 - Algoritmo para determinação do comportamento e comprimento do jato bifásico.

5.4 Determinação do Comprimento do Jato Bifásico

É possível prever a extensão do jato bifásico, representada por "z" na Figura 21, avaliando-se em que distância as gotas irão evaporar-se completamente. Assumindo que a componente axial da velocidade da gota é igual a mesma componente da velocidade média do jato, a distância percorrida pela gota pode ser determinada a partir da Equação (5.35).

$$dX = u_{med}dt \tag{5.35}$$

A equação é integrada do tempo inicial 0 ao momento em que a gota evapora completamente, e a velocidade média do jato diminui conforme a distância aumenta. Esta velocidade foi obtida conforme mostra o subtópico seguinte.



Figura 21 – Esquema de localização das propriedades do jato bifásico.

Fonte: Autor.

5.5 Determinação da Velocidade e Concentração do Jato

A correlação semi-empírica (Equação (5.36)) utilizada para determinar a velocidade máxima das gotas (componente axial) foi baseada na apresentada em Kukkonen (1990) e obtida por Hinze e Zijnen (1949) através de experimentos conduzidos isotermicamente para jatos turbulentos monofásicos. A equação pode ser aplicada ao jato bifásico a partir da região final de expansão (ponto f – Figura 19).

$$u_{max} = u_f \cdot C_u \cdot \left(\frac{2b_f}{X + 0.6(2b_f)}\right)$$
(5.36)

X é admitida como sendo a distância axial a partir do ponto "f"(X_x) mais a distância referente a origem virtual (X_0) e C_u assume um valor igual a 6.39 na referência citada. Baseado em Ali e Thurow (s.d.) obteve-se uma estimativa para esta origem a partir da Equação (5.37).

$$X_0 = \frac{5d_f}{2}$$
(5.37)

Onde d_f é o diâmetro no fim da região de expansão.

A velocidade média do jato é considerada como sendo metade da velocidade do fluxo axial do jato, com base nos resultados experimentais para as distribuições de jatos turbulentos em Hinze e Zijnen apud Kukkonen (1990).

O perfil de concentração do componente em relação ao ar seco, também pode ser obtido a partir das correlações para jatos turbulentos livres uma vez que o comportamento do jato dos pontos f à j pode ser considerado o mesmo. Sendo assim, com base no trabalho de Chen e Rodi (1980), a correlação utilizada para obtê-lo é apresentada na Equação (5.38).

$$\frac{c_c(X)}{c_f} = C'_c \cdot \frac{b_f}{X}$$
(5.38)

Onde c_c é a concentração na linha central do jato e depende somente da distância e C'_c é uma constante empírica. O valor para esta constante depende da densidade do vapor no jato, se ela for diferente da densidade do ar é necessário incluir um termo de correção na equação acima.

$$C_{c}' = \sqrt{\frac{\rho_{a}}{\rho_{f,v}}} C_{c}$$
(5.39)

A contante C_c é descrita em alguns trabalhos como constante de decaimento, podendo variar ao longo de uma gama de valores dependendo de fatores incluindo perfis de velocidade iniciais, formas de bocal e quantidade de arrasto de fluxo próximo a saída do jato, para jatos turbulentos circulares. A constante de decaimento é freqüentemente citada para ter um valor igual a 5,0 (por exemplo, FISCHER et al., 1979) enquanto Antoine et al. (2001) sugeriram valores entre 5,1 e 6,3 (HUSSEIN et al. 1994, ANTOINE et al. 2001, XU e ANTONIA 2002, BABU e MAHESH 2004).

Dado que no final da região de expansão não há influência do ar ambiente, este ponto será constituído apenas do componente que é liberado. Sendo assim, como forma de avaliar o melhor valor da constante de decaimento para os casos estudados, a distribuição radial da concentração é considerada uniforme, ou seja, a concentração máxima em "f" é igual a concentração média no mesmo ponto ($\frac{c_c(X)}{c_f} = 1$). Sendo assim, a constante foi determinada

conforme a Equação (5.40).

$$C_{c} = \frac{\frac{X}{b_{f}}}{\sqrt{\frac{\rho_{a}}{\rho_{f,v}}}}$$
(5.40)

5.6 Extensão da Nuvem de Vapor

A evaporação das gotas resultará na formação de uma nuvem de vapor que formará uma atmosfera explosiva. Neste caso, as condições iniciais da nuvem serão as mesmas do ponto "j" tais como: a concentração do componente (c_j), a densidade do jato (ρ_j), a temperatura (T_j) e a velocidade (u_j). A nuvem irá se dispersar como um jato subsônico turbulento, dessa forma, a extensão do ponto "j" até o LEL, foi determinada a partir da correlação de Long (1963) apud Lees (1996) para jato subsônico em regime turbulento.

$$\frac{C_c(X)}{c_j} = \frac{1}{k_1} \left(\frac{b_j}{X + X_V} \right) \left(\frac{\rho_a}{\rho_j} \right)^{\frac{1}{2}}$$
(5.41)

$$\frac{C_{med}(r,X)}{C_c(X)} = k_2 \left(\frac{2b_j}{X+X_V}\right) \left(\frac{\rho_a}{\rho_j}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot e^{\left(-\left(\frac{k_3r}{X+X_V}\right)^2\right)}$$
(5.42)

Onde $k_1=0.32$, $k_2=6$, $k_3=5$ e X_V = distância até a origem virtual aqui admitida como sendo igual a extensão do jato bifásico.

Para determinar a extensão da nuvem, substitui-se a fração do gás combustível pelo seu limite inferior de inflamabilidade na linha central (r=0).

5.7 Cenários de Vazamento/Liberação

5.7.1 Liberação de Acetona (sem flash)

De acordo com Mcmillan (1998), acetona é transportada em um tubo, situado a 3 m do chão, com juntas flangeadas normais à 22 °C (295,15 K) e uma pressão de 10^5 N.m⁻². Neste

transporte, ocorre uma falha em uma das juntas flangeadas e cujo orifício resultante apresenta uma área de 4.10⁻⁵ m². A Tabela 13 (Anexo D) apresenta algumas propriedades necessárias para aplicação da metodologia utilizada para liberação de líquidos sem evaporação parcial.

5.7.2 Cenários de Liberações Bifásicas

A taxa de emissão foi calculada utilizando-se a Equação (4.14) e a velocidade de emissão de acordo com a Equação (5.43).

$$u_{e} = C_{D} \left[\frac{2(P - P_{a})}{\rho_{e,L}} \right]^{\frac{1}{2}}$$
(5.43)

Aqui, $\rho_{e,L}$ é a densidade da fase líquida do componente no ponto de liberação. A velocidade do fluido (fase líquida + fase vapor do componente) pode ser considerada igual a velocidade da fase líquida uma vez que o equilíbrio termodinâmico na saída é assumido.

5.7.2.1 Vazamento de Butano

Neste caso o jato bifásico segundo Bosch (2005), surge a partir da liberação de butano armazenado em um recipiente com 1000 m³ à temperatura ambiente de 288,15 K. O recipiente está conectado a um tubo de 68 mm de diâmetro o qual sofre uma quebra total à 10 cm da conexão e 1 m do solo. A liberação de butano possui um coeficiente de descarga de 0,8 e uma área de saída de 0,00363 m². Assume-se que a humidade relativa do ambiente é de 63% e que não há flasheamento no interior do tubo. Os dados de entrada são resumidos na Tabela 6. O LEL utilizado foi de 1,9% de volume do componente em ar.

Símbolo	Definição	Valor	Unidade	
be	Raio do orifício	0,034	m	
h _s	Altura da fonte	1	m	
Te	Temperatura na saída	288,15	К	
Pe	Pressão na saída	174549	N.m ⁻²	
$\mathbf{P}_{\mathbf{a}}$	Pressão ambiente	101325	N.m ⁻²	

Tabela 6 - Inputs para liberação de butano.

5.7.2.2 Vazamento de Propano

O caso para a liberação de propano foi baseado em uma simulação em CFD realizada no Laboratório de Experimentação Numérica de Processos (LENP). Os dados de entrada são resumidos na Tabela 7 e o LEL utilizado foi de 2,2% de volume do componente em ar.

Símbolo	Definição	Valor	Unidade	
De	Diâmetro do orifício	1,39	mm	
hs	Altura da fonte	0,5	m	
Te	Temperatura na saída	231,15	К	
Ts	Temperatura de armazenamento	321	К	
Ta	Temperatura ambiente	298,15	К	
Pe	Pressão na saída	101325	N.m ⁻²	
Pa	Pressão ambiente	101325	N.m ⁻²	
P ₀	Pressão de armazenamento	20,638	bar	
RH	Umidade relativa	73%	-	

Tabela 7 - Inputs para liberação de Propano.

CAPÍTULO 6

6. RESULTADOS E DISCUSSÃO

6.1 Resultados para Liberação de Acetona

Os resultados obtidos para este caso estão na Tabela 8. Como se pode observar, para as condições estabelecidas, a acetona é liberada a uma taxa de 0,40 kg.s⁻¹ e com uma velocidade de 12,7 m.s⁻¹, a qual faz com que o jato percorra uma distância de aproximadamente 10,0 m até atingir o chão. A poça formada terá uma área de 308,0 m² e, consequentemente, um raio de aproximadamente 10,0 m. A poça é vaporizada a uma taxa de 0,40 kg.s⁻¹, formando uma nuvem que se estende por 1,72 m (aproximadamente 2 m) até o LEL.

Parâmetro	Resultado
$G_L(\text{kg.s}^{-1})$	0,40
$v (m.s^{-1})$	12,7
<i>d</i> (m)	9,93
$A_{p}\left(\mathrm{m} ight)$	308,0
r_p (m)	9,90
G_g (kg.s ⁻¹)	0,40
<i>X</i> (m)	1,72

Tabela 8 - Resultados para liberação de acetona líquida.

Os valores obtidos para a distância de alcance do jato, o raio da poça e a extensão devido a evaporação da mesma, são aproximados para os valores mais próximos acima, isso irá gerar como resultado uma área ligeiramente maior fazendo com que haja uma margem de segurança. Dessa forma, a extensão horizontal total da área classificada para este caso é de 22 m. Este resultado condiz com o obtido por Mcmillan (1998).

6.2 Resultados para Liberação de Butano

Os resultados mais relevantes para cada etapa realizada com o butano como componente, encontram-se na Tabela 9. Utilizou-se um coeficiente de descarga igual a 0,8.

Etapa	Parâmetro	Descrição	Valor	Unidade
Condições no jato depois do flash	uf	Velocidade do fluido	26,02	m.s ⁻¹
	$\Phi_{m,f}$	Fração mássica de vapor	0,104	-
	$ ho_{ m f}$	Densidade média	24,014	kg.m ⁻³
	$A_{\rm f}$	Área da seção transversal	0,067	m²
	$b_{\rm f}$	Raio do jato	0,146	m
Diâmetro das gotas	dd	Diâmetro da gota	252,64	μm
	u _d	Velocidade de queda livre da gota	1,00	m.s ⁻¹
Rainout	T_d	Temperatura da gota	214,57	Κ
Kainout	d _M	Diâmetro máximo	473,00	μm
	Re _d	Número de Reynolds em d _d	15,06	-
Condições após a evaporação das gotículas	Tj	Temperatura do jato após a evaporação das gotas	223,8	K
	c _j	Razão molar em base seca do jato após a evaporação das gotas	0,147	-
	Cw	Razão molar do vapor de água à T_a	0,011	-
	$c_{\rm wv}$	Razão molar do vapor de água à T_j	87,2.10-6	-
	C _{jL}	Razão molar de água líquida adicional	0,005	-
	ρj	Densidade do jato após a evaporação das gotas	2,05	kg.m ⁻³
	uj	Velocidade do jato em j	5,89	m.s ⁻¹
	A_j	Area da seção transversal do jato	3,45	m
	bj	Raio do jato	1,04	m

Tabela 9- Resumo dos resultados obtidos para a liberação de butano.

A fração mássica de vapor real na saída para este caso é de aproximadamente 0,18%, valor relativamente pequeno. Sendo assim, considerou-se que neste ponto a substância ainda encontra-se no estado líquido ($\Phi_{m,e} = 0$).

Na etapa referente a ocorrência de *rainout*, ao comparar-se o diâmetro da gota e o diâmetro máximo observa-se que aquele é menor que este $(d_d < d_M)$, no entanto, o número de

Reynolds avaliado no diâmetro da gota, apresenta um valor (15,06) que excede a faixa de validade ($\text{Re}_d < 4$) indicando que algumas gotículas podem atingir o chão.

A Figura 22 apresenta os gráficos obtidos para a evolução do diâmetro da gota $(d_d(t))$, para a altura de queda e para o fluxo mássico líquido do jato para o ar, todos obtidos em função do tempo que a gota leva para possivelmente alcançar o chão formando uma poça. Observa-se que a gota não percorre toda a distância equivalente à altura de liberação h_s, evaporando-se completamente antes de alcançar 0,65 m.

Embora neste caso específico haja evaporação total da gota, é importante salientar que este resultado não assegura que a chuva de fato não ocorre, uma vez que, este fenômeno também dependerá do momento da gotícula, além de, em condições reais, as mesmas assumirem diferentes dimensões.



Figura 22 - (a) Diâmetro da gota; (b) Altura da gota.

A Figura 23 mostra o alcance da gota de 0,25 mm a partir da região final de flasheamento em relação ao seu diâmetro e sua posição inicial no jato. Como pode ser observado, a gota desaparece a uma distância de aproximadamente 5,89 m da fonte. Considerando que as gotas são uniformes e que portanto, evaporam no mesmo ponto, esta é a extensão do jato bifásico. A Figura 24 mostra o perfil de velocidade horizontal dessa gota.





Figura 24 - Perfil da velocidade horizontal da gota.



Após a evaporação de todas as gotas o jato é constituído de 14,7% de butano em ar seco, além de 1,1% de vapor de água ambiente. Como visto, nessa região é possível haver vapor de

água condensado cuja razão molar é dada por c_{jL} . Sendo assim, no caso estudado, tem-se 0,5% de vapor de água condensado no ponto "j".

Bosch et al. (2005) obtém a temperatura em "j" igual a 227,3 K, $c_j = 0,138$, $u_j = 6,29$ e um raio de 0,64 m. Em comparação aos valores obtidos neste trabalho, esses resultados diferem tendo em vista que foram realizadas correções na metodologia sugerida na referida literatura.

6.2.1 Extensão da Área Classificada

O modelo proposto por Long (1963), juntamente com a Equação 5.32, resultou em uma área de 85,96 m (\approx 86 m) como pode ser observado na Figura 25.

A Figura 26 apresenta o perfil de concentração máxima ao longo de todo o jato bifásico.



Figura 25 - Perfil de concentração máxima ao longo da área classificada.

Figura 26 - Perfil de concentração máxima ao longo do jato bifásico.



6.3 Resultados para Liberação de Propano

Na Tabela 10 estão resumidos os resultados obtidos para o caso de liberação de propano. Neste caso, a fração mássica de vapor obtida na saída é de aproximadamente 67,48% e a velocidade é de 61,75 m.s⁻¹, valores próximos aos obtidos na simulação (68,81% e 61,98 m.s⁻¹), para um coeficiente de descarga (C_D) de 0.65.

Etapa	Parâmetro	Descrição	Valor	Unidade
Condições no jato depois do flash	uf	Velocidade do fluido	61,75	m.s ⁻¹
	$\Phi_{ m m,f}$	Fração mássica de vapor	0,675	-
	$ ho_{ m f}$	Densidade média	3.44	kg.m ⁻³
	A_{f}	Área da seção transversal	20,89	μm²
	b_{f}	Raio do jato	0,003	m
Diâmetro das gotas	d _d	Diâmetro da gota	43,00	μm
	ud	Velocidade de queda livre da gota	0,030	m.s ⁻¹
Rainout	T_d	Temperatura da gota	194,3	K
	d_{M}	Diâmetro máximo	180,6	μm
	Red	Número de Reynolds em d _d	0,07	-
Condições após a evaporação das gotículas	Tj	Temperatura do jato após a evaporação das gotas	211,68	K
	cj	Razão molar em base seca do jato após a evaporação das gotas	0,55	-
	c_{w}	Razão molar do vapor de água à T_a	0,02	-
	$c_{\rm wv}$	Razão molar do vapor de água à T_j	2,2.10-5	-
	c_{jL}	Razão molar de água líquida adicional	0,007	-
	ρj	Densidade do jato após a evaporação das gotas	3,08	kg.m ⁻³
	$u_{j} \\ A_{j}$	Velocidade do jato em j Área da seção transversal do jato	27,95 51,48	m.s ⁻¹ μm
	$\mathbf{b}_{\mathbf{j}}$	Raio do jato	0,004	m

Tabela 10 – Resumo dos resultados para liberação de propano.

Como pode ser observado, ao comparar-se o diâmetro da gota e o diâmetro máximo observa-se que $d_d < d_M$, e o número de Reynolds avaliado no diâmetro da gota, apresenta um valor (0,07) inferior a faixa de validade (Re_d < 4), sendo assim o fenômeno denominado de chuva não irá ocorrer.

A Figura 27 apresenta os gráficos obtidos para a evolução do diâmetro da gota $(d_d(t))$ e para a altura de queda, todos obtidos em função do tempo que a gota leva até evaporar completamente. Como era de se esperar, a gota evapora-se rapidamente antes de alcançar 0,497 m.



Figura 27 - Figura 27 - (a) Diâmetro da gota; (b) Altura da gota.

A Figura 28 mostra o alcance da gota de diâmetro igual a 43 μm a partir da região final de flasheamento. Como pode ser observado, a gota desaparece a uma distância de aproximadamente 0,57 m da fonte. Sendo assim, a extensão do jato bifásico é também igual a

0,57 m. Na Figura 29 observa-se o comportamento da velocidade média da gota ao longo da região bifásica.



Figura 28 - Alcance da gota.

Figura 29 - Perfil da velocidade média da gota ao longo da região bifásica.



Comparou-se o perfil do diâmetro da gota em relação a distância percorrida até sua evaporação com o resultado obtido em CFD (Figura 30).



Figura 30 - Comparação do alcance da gota obtido pelo modelo utilizado com o CFD.

6.3.1 Extensão da Área Classificada

A extensão total obtida até o LEL foi de aproximadamente 1,3m como pode ser observado na Figura 31 na qual se tem o perfil de concentração do componente ao longo de toda a área classificada. A Figura 32 mostra o perfil somente até o final da região bifásica.

Figura 31 - Perfil de concentração do propano ao longo de toda área classificada.





Figura 32 - Perfil de concentração ao longo da região bifásica.

A região de concentração constante corresponde a região de flasheamento onde admitese que o ar ambiente não irá influenciar no processo. Dessa forma, apenas o componente químico estará presente, como já mencionado.

Na Figura 33 o perfil de concentração do componente é comparado ao obtido em CFD. Observa-se que o modelo utilizado neste trabalho apresenta resultados bastante aceitáveis.

Figura 33 - Comparação do perfil de concentração do componente liberado ao longo da área classificada com o CFD.



CAPÍTULO 7

7. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os sistemas de liberações bifásicas possuem uma considerável complexidade e a maioria das correlações existentes na literatura para modelagem do jato são empíricas. Porém, essa modelagem se faz necessária afim de prever a extensão da área de risco e antes de se utilizar modelos de jatos para dispersão de nuvens de vapor, visto que para estes é necessário descrever a expansão inicial da liberação pressurizada.

Diante dos resultados obtidos, observou-se que o modelo utilizado para prever a extensão da área classificada para o propano como componente da liberação, apresentou um resultado satisfatório quando comparado ao obtido em CFD, apresentando ambos aproximadamente 1,3 m de extensão. A extensão para a situação de vazamento do butano apresentou um valor conservativo (86 m), tendo em vista que o orifício de vazamento possui um diâmetro considerável.

Embora o modelo do jato bifásico consista basicamente de correlações empíricas, em conjunto com o modelo para jatos turbulentos livres, a extensão da área classificada para os casos estudados é razoavelmente prevista. Entretanto, para melhor avaliação seria necessário aplicar o modelo em diferentes condições de vazamento, previamente simuladas e/ou experimentadas, e comparar os resultados. Ainda assim, os resultados obtidos neste trabalho foram importantes uma vez que podem auxiliar em situações semelhantes na classificação de áreas.

A experiência e o bom senso da equipe envolvida em projetos de classificações de áreas de risco, também se fazem necessário. Isso se deve ao fato de que, ter um conhecimento prévio do processo, de maneira a melhor compreendê-lo, é de suma importância tornando possível prever situações adversas e, a partir delas, controlar as condições do sistema afim de evitar acidentes.

No levantamento bibliográfico realizado não foram encontrados dados de extensão para casos de liberações bifásicas, sendo assim, este trabalho possui uma inovação prática podendo servir como base para normatização do cálculo de extensão de áreas classificadas para liberações bifásicas.

7.1 Sugestões para Trabalhos Futuros

Como sugestão de estudo futuro recomenda-se a aplicação do modelo em outras situações de vazamento bifásicas previamente simuladas ou/e experimentadas, quando possível. Recomenda-se ainda o ajuste do modelo para misturas multicomponentes e aplicação em casos que envolvam frações de petróleo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AMARAL, A. B. Estudo de Classificação de Áreas em uma Sala de Carregamento de Baterias. Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Monografia de Especialização, Curitiba, 2015;

AMERICAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS – AICHE. Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis. New York. Wiley-Interscience: 2 ed., 2000;

ANTOINE, Y.; LEMOINE, F.; LEBOUCHE, M. **Turbulent transport of a passive scalar in a round jet discharging into a coflowing stream**. Euro. J. Mech. B/Fluids 20, 275-301, 2001;

Avaliação e Controle dos Riscos Atmosféricos nos Espaços Confinados. Disponível em: < <u>https://pt.slideshare.net/audemaro/2nr-33-deteco-de-gases-e-ventilao</u>>. Acesso em: 23 de abril de 2017;

BAHADORI, Alireza. Hazardous Area Classification in Petroleum and Chemical Plants: A Guide to Mitigating Risk. New York. CRC Press, 2013;

BABU, P.C.; MAHESH, K. Upstream entrainment in numerical simulations of spatially evolving round jets. Phys. Fluids 16(10), 3699-3705, 2004;

BHOSALE, V.A.;PATIL, K.I.;DEHANKAR, P.B. **Study of Accidental Releases Heavy Gas Dispersion Comparing Slab Models and Screen-3 Model**. International Journal of Engineering Sciences & Research Technology. 2015;

BIGOT, Jean-Pierre; TOUIL, Abdellah; BONNET Patrick; LACOME, Jean-Marc. Flashing liquid Fragmentation : is there a hindered mass?. 3rd International Symposium on Two-Phase Flow Modelling and Experimentation, Pisa, 22-24 september 2004;

BONNET, Patrick; LACOME, Jean-Marc. **Experimental study of accidental industrial LPG releases.** Annual loss prevention Symposium, Apr 2006, Orlando, United States. American Institute of Chemical Engineers (AIChE). New York, pp.453-462, 2006;

BOSCH, C.J.H. van den; WETERINGS, R.A.P.M.; DUIJM, N.J.; BAKKU, E.A.; MERCX, W.P.M.; BERG, A.C. van den; ENGELHARD, W.F.J.M.; DOORMAN, J.C.A.M. van; WEES, R.M.M.. Methods for the calculation of physical effects: due to releases of hazardous materials (liquids and gases). Yellow Book. 3.ed., 2005;

BRITTER, R.E. **Recent research on the dispersion of hazardous materials**. Department of Engineering University of Cambridge Cambridge United Kingdom. 1998;

BROWN, R.; YORK, J. L. Sprays Formed by Flashing Liquid Jets. Aiche Journal, 1962. 8(2): p. 149-153;

BULGARELLI, Roberval. Instalações Elétricas e de Instrumentação para Áreas Classificadas. Requisitos para automação de projetos e para estudos de classificação de áreas. Revista o Setor Elétrico, 2009;

CALAY, R.K.; HOLDO, A.E. Modelling the dispersion of flashing jets using CFD. Journal of Hazardous Materials . Volume 154, Issues 1–3, Pages 1198–1209, 2007;

CASAL, Joaquim. Evaluation of the Effects and Consequences of Major Accidents in Industrial Plants. Industrial Safety Series, v.8, Elsevier. Amsterdam, 2008;

Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers, **Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis**, 2nd Edition, Library of Congress Cataloging-in-Publication Data, New York, 2000;

CHEN, C.J. e RODI, W. Vertical turbulent buoyant jets, Pergamon Press, Oxford, 1980;

CHU, J. **Análise de Riscos nas Indústrias Petroquímicas.** Satúbal, 2014. 140f. Dissertação (Metrado em Segurança e Higiene do Trabalho) – Instituto Politécnico de Satúbal, Portugal, 2014;

CÍCERO, Roberto. CONATEX Conformidade em Atmosfera Explosiva. **Treinamento para Operadores em Áreas Classificadas contra Riscos de Explosão**. São Paulo, 2014;

COSTA, A. K. Especificações Técnicas de Motores Elétricos de Baixa Tensão para Aplicação em Áreas Classificadas. Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande Do Sul. Trabalho de Conclusão de Curso. Ijuí, 2016;

COWARD, H. F.; JONES, G. W. Limits of Flammability of Gases and Vapors. United States Department of the Interior, Bureau of Mines. Washington, 1952;

COX, A.W.; LEES, F.P.; ANG, M.L..Classification of Hazardous Locations, IChemE, Rugby, UK. 1990;

CROWL,D.; LOUVAR, J.F. Chemical Process Safety: fundamentals with applications.2° ed. 2002;

CRUZ, S.R.A.. Análise Comparativa das Metodologias Utilizadas para Classificação de Áreas Potencialmente Explosivas em Unidades de Refino de Petróleo. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química. Dissertação de mestrado. Rio de Janeiro, p. 136. 2012;

DAI, Weiping. Applying Proper Dispersion Models for Industrial Accidental Releases. AWMA annual conference, Paper N° 726. Dallas, 2004;

DEVAULL, George E.; KING, John A.; LANTZY, Ronald J.; FONTAINE, David J. **Understanding Atmospheric Dispersion of Accidental Releases**. Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers, 1995;

DUPLANTIER, Stéphane; COUILLET, Jean-Christophe. **Dispersion de gaz liquéfiés dans um environnement industriel.** Préventique sécurité, 2003;

ERTHAL, L. **ATMOSFERAS POTENCIALMENTE EXPLOSIVAS: Um estudo de caso como contribuição para a classificação de áreas na atividade da indústria do Petróleo, Química e Petroquímica.** Universidade Federal Fluminense. Dissertação de mestrado. Niterói, Rio de Janeiro, p. 120. 2004;

FAUSKE, H.K.; EPSTEIN, M. Source term considerations in connection with vapour cloud modelling. *J Loss Prev Proc Ind.* 1988;

FAUSKE, H.K. Flashing Flows or: Some Practical Guidelines for Emergency Releases. Plant/Operations Progress, vol. 4, N°3, 1985;

FUDOLI, J. U. **M5 D1 - Proteção Contra Incêndios e Explosões II. Classificação de Áreas para Equipamentos Elétricos**. Pitágoras Pós-Graduação, 2012;

GARSIDE, R. Electrical apparatus and hazardous areas. Aylesbury, Buckinghamshire,UK: Hexagon Technology Limited, 2 ed.rev., 1995;

HANNA, S.; BRITTER, R.; LEUNG, J.;WEIL, J. **Toxic Industrial Chemical (TIC) Source Emissions Model Improvements for Pressurized Liquefied Gases.** Journal Paper Source Models. 2009 jet releases only;

HEBRARD, J.; LACOME, Jean-Marc. **Evaluation of two-phase flow models for accidental release and comparison with experimental data**. 11. International Conference Multiphase Flow in Industrial Plant (MFIP'2008), Sep 2008, Palermo, Italy. ANIMP Servizu SRL. Milano, pp.747-754, 2008;

HUSSEIN, H.J.; CAPP, S.P.; GEORGE, W.K.. Velocity measurements in a highReynoldsnumber, momentum-conserving, axisymmetric, turbulent jet. J. Fluid Mech. 258, 31-75, 1994;

IBARS, F. E.; TORRENT, J.G.. Manual Práctico Clasificación de Zonas em Atmosferas explosivas. Colegio de Ingenieros Tecnicos Industriales de Barcelona - CETIB. Espanha, 2005;

ICHARD, Mathieu; HANSEN, Olav; MELHEIM, Jens. Modelling of Flashing Releases Around Buildings. p. 10, 2015;

ICHARD, Mathieu. Numerical computations of pressurized liquefied gas releases into the atmosphere. University of Bergen .Dissertation for the degree of Philosophiae Doctor, 2012;

INSTITUTE OF PETROLEUM. **Model code of safe practice in the petroleum industry**. part 15: area classification code for installations handling flammable fluids.2. ed. London: The Institute of Petroleum, 2002;

JOHNSON, D. W.; WOODWARD, J. L.. **RELEASE: A Model with Data to Predict Aerosol Rainout in Accidental Releases**. Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers, 1999;

JORDÃO, D. M.; FRANCO, L. R.. **Prevenção Contra Explosões e Outros Riscos**. Curitiba: PETROBRAS : UnicenP, 2002;

KOORNNEEF, J.; SPRUIJTB, M.; MOLAG, M.; RAMIREZ, A.; FAAIJ, A.; TURKENBURGA, W. Uncertainties in risk assessment of CO2 pipelines. Science Direct. Energy Procedia, p. 1587-1594, 2009;

KUKKONEN,J.; NIKMO, J. Modeling heavy gas cloud transport in sloping terrains. J. Haz.Mat., 31, 1992;

Kukkonen, J. Modelling source terms for the atmospheric dispersion of hazardous substances,

Commentationes Physico-Mathematicae 115/1990, Finnish Society of Sciences and Letters, Helsinki, (1990);

LACOME, Jean-Marc; LEMOFACK, Cédric; REVEILLON, Julie; DEMOULIN, F. X.. **Numerical modelling of flashing liquid jets due to leakage of lique_ed gas storage**. 43. ESReDA Seminar on Land Use Planning and Risk-Informed Decision Making "Amenagement du Territoire et Prise de Decision en Maitrise des Risques", Oct 2012, Rouen, France. pp.NC, 2012;

LEES, F.P., "Loss Prevention in the process industries: hazard identification, assessment and control", Second Edition, Butterworth-Heinemann, Oxford (1996);

MCMILLAN, A.. Electrical Installations in Hazardous Areas. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1998;

_____. NBR IEC 60079 – Atmosferas explosivas parte 1: proteção de equipamentos por invólucros à prova de explosão "d". Rio de Janeiro, 2009. 69p;

_____. NBR IEC 60079 – Atmosferas explosivas parte 10: classificação de áreas - atmosferas explosivas de gás. Rio de Janeiro, 2009. 63p.

_____.NBR 17505-1: Armazenamento de Líquidos Combustíveis – Parte 1. Rio de Janeiro: ABNT, 2006;

_____. **N-2166** – Classificação de Áreas para Instalações Elétricas em Refinarias de Petróleo. Rio de Janeiro: Petrobras. 34 p.,1999;

_____. N-2918 – Atmosferas Explosivas-Classificação de Áreas. Petrobras. 238 p.,2017;

NETO, Francisco A. O.. Instalações Elétricas em Atmosferas Potencialmente Explosivas: Noções Básicas. Mossoró, Rio Grande do Norte. 2010; OBE, W. C.; MCLEAN, I. Electrical equipment for flammable atmospheres, Londres: International Conference on Explosion Safety in Hazardous Areas. England: Institute of Electrical Engineers, 1999;

OLIVEIRA, Marcos de. **Estudo Sobre Incêndios de Progresso Rápido.** Universidade Federal de Santa Catarina. Centro Universitário de Estudos e Pesquisas Sobre Desastres. Monografia de Especialização. Florianópolis-SC, 2005;

OTSUKA, A. H. Análise Quantitativa da Extensão de Áreas Classificadas. Universidade Federal de Sergipe. Dissertação de Mestrado. Sergipe, 2011;

PERRY, R.H.; GREEN, D.W. e MALONEY, J.D..**Perry Chemicals Engineering Handbook**, 7th Edition, McGrawhill, Section 26 "Process safety", 1999;

PETRÓLEO BRASILEIRO S.A. – PETROBRAS. Comitê de Normas Técnicas(CONTEC): Norma PETROBRAS N-2166 – classificação de áreas para instalações elétricas em refinarias de petróleo. Rio de Janeiro: Petrobras, 2001;

PRICE, C.S.; TICKLE, G.A.; ATTREE, M.W.; LAD, C.S.; CARRUTHERS, D.J. **High Level Review of the Sensitivity of Dispersion Model Predictions to Individual Source Term Parameters.** ADMLC, 2016;

SANTOS, A. Licenciamento das instalações fabris de uma unidade de produção de API's, aplicação da Directiva ATEX, e Qualificação de equipamentos. 112f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Técnica de Lisboa. Lisboa, 2008;

SCHRAM, Peter J., EARLEY, Mark W. **Eletrical Installations in Hazardous Locations**. 3^a edition. USA, Massachusetts, Quincy: USA National Fire Protection Association, 1993;

SILVA, A. L. O. **Avaliação das instalações elétricas e de instrumentação em um processo de manufatura com etanol**. Universidade Federal de Pernambuco, Centro de Tecnologia e Geociências. Monografia de Especialização, Recife, 2009;

SKOGESTAD, S. Chemical and Energy Process Engineering. CRC Press. 2009;

SOARES, G. J.; GOMES, V. M.; CHAVES, F. S.; ELER, E. O. Instalações Elétricas em Atmosfera Explosiva. Centro Universitário de Belo Horizonte, Belo Horizonte – MG, 2015;

STÄDTKE, Herbert. Gasdynamic Aspects of Two-Phase Flow. Hyperbolicity, Wave Propagation Phenomena, and Related Numerical Methods. Wiley-VCH. 2006;

TeoriadoFogo.Disponívelem:<<u>http://apoiotecnicoemsegurancadotrabalho.wordpress.com/teoria-dofogo/</u>>. Acesso em: 23 deabril de 2017;

WEBBER, D.M., BRIGHTON, P.W.M. Generalisation of the Two-Phase Jet Model TRAUMA to Other Substances than Ammonia. Report SRD/HSE/R494, SRD, Culcheth, Cheshire, U.K, 1989;

WEIMER, J.C.; FAETH, G.M. e OLSON, D.R. Penetration of Vapor Jets Submerged in Subcooled Liquids. Aiche Journal, vol. 19, No 3, 1973;

WITLOX, Henk W.M.; HARPER, M.; OKE, A.; BOWEN, P.; KAY, P.; JAMOIS, D.; PROUST, C. Two-Phase Jet Releases and Droplet Dispersion: Scaled and Large-Scale Experiments, Droplet-Size Correlation Development and Model Validation. 16th Conference on Air Pollution Meteorology. Atlanta, 2010;

XU, G. E ANTONIA, R.A.. Effect of different initial conditions on a turbulent round free jet. Exp. Fluids 33, 677-683, 2002.

YAWS, C. L. Yaws' Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds, 2003.

APÊNDICE – Propriedades e termodinâmica do jato

A concentração no jato correspondente à quantidade de ar que tem de ser arrastada para ele a fim de evaporar todos os aerossóis, e é calculado a partir do balanço de entalpia. Sendo assim, a variação total de entalpia devido à mudança de temperatura, à evaporação de um aerossol ou condensação da humidade ambiente, precisa ser zero.

$$\Delta H_{ch} + \Delta H_{da} + \Delta H_{wv} = 0 \tag{1}$$

Enquanto as gotas estão presentes, até ao momento em que todo o líquido tenha evaporado, a pressão parcial do vapor é igual à pressão de saturação à temperatura do jato T_j. Dessa forma a razão molar do vapor no jato c_j é dada por:

$$c_{j} = \frac{n_{ch}}{n_{da}} \; (\text{mol}_{ch,j} \,/ \text{mol}_{da}) \tag{2}$$

onde n_{ch} e n_{da} são o número de mols do produto químico liberado e do ar seco, respectivamente, e são obtidos conforme equações (3) e (4).

$$n_{ch} = \frac{P_v^0(T_j)V}{RT_j}$$
 (3) , $n_{da} = \frac{P_a V}{RT_a}$ (4)

Sendo assim, c_j é dado por:

$$c_{j} = \frac{P_{v}^{0}(T_{j})T_{a}}{P_{a}T_{j}}$$
(5)

onde $P_{\nu}^{0}(T_{j})$ é a pressão de vapor do produto químico na temperatura no jato, T_a e P_a temperatura e pressão ambientes e T_i a temperatura no jato.

A fração mássica de vapor de água no ar seco ambiente é dada por:

$$c_{w} = \frac{n_{w}}{n_{da}} \quad (\text{mol}_{w,a}/\text{mol}_{da}) \tag{6}$$

onde n_w é o número de mols do vapor de água a temperatura ambiente, e pode ser obtido pela Equação (7).

$$n_{w} = \frac{P_{w}V}{RT_{a}} = \frac{RH_{a}P_{w}^{0}(T_{a})V}{RT_{a}}$$
(7) , $n_{da} = \frac{m_{da}}{\mu_{da}} = \frac{\rho_{da}V}{\mu_{da}}$ (8)

Substituindo as equações (7) e (8) em (6), a razão de vapor de água por ar seco será:
$$c_{w} = \frac{\frac{RH_{a}P_{w}^{0}(T_{a})V}{RT_{a}}}{\frac{\rho_{da}V}{\mu_{da}}} \rightarrow c_{w} = \frac{RH_{a}P_{w}^{0}(T_{a})}{\binom{R}{\mu_{da}}T_{a}\rho_{da}}$$
(9)

onde $P_w^0(T_a)$ é a pressão de vapor da água na temperatura ambiente, RH_a é a umidade relativa, R é a constante dos gases, μ_{da} é o peso molecular do ar e ρ_{da} a densidade do ar.

Após o ar no jato ser arrefecido até a temperatura T_j , parte do vapor de água pode condensar-se. A fração restante da massa de vapor de água é então determinada por:

$$c_{wv} = \frac{n_{wv}}{n_{da}} \,\left(\text{mol}_{wv,j} \,/ \text{mol}_{da} \right) \tag{10}$$

onde n_{wv} é o número de mols do vapor de água na temperatura do jato e pode ser obtido a partir da Equação (11).

$$n_{wv} = \frac{P_{wv}V}{RT_j} = \frac{P_{wv}^0(T_j)V}{RT_j}$$
(11)

onde $P^0_{wv}(T_j)$ é a pressão de vapor da água na temperatura do jato.

Multiplicando-se a Equação 10 por $\left(\frac{n_w}{n_w}\right)$, mantendo-a inalterada, tem-se:

$$c_{wv} = \frac{n_{wv}}{n_{da}} \times \frac{n_w}{n_w} = \frac{n_{wv}}{n_w} \times \frac{n_w}{n_{da}}$$
(12)

$$c_{wv} = \frac{n_{wv}}{n_w} c_w \tag{13}$$

Substituindo as Equação (7) e (11) em (13), a razão molar do vapor de água à T_j será:

$$c_{wv} = \frac{T_a P_w^0(T_j)}{RH_a P_w^0(T_a) T_j} c_w$$
(14)

Dados c_j , c_w e c_{wv} , as variações de entalpia do ar seco, do vapor de água e do produto químico liberado podem ser obtidas conforme mostram as equações seguintes.

1) Variação de entalpia do ar seco:

$$\Delta H_{da} = n_{da} C p_a (T_a - T_j) \tag{15}$$

Dividindo por n_{da} , tem-se:

$$\Delta H_{da} = C p_a (T_a - T_j) \tag{16}$$

onde Cpa é o calor específico do ar.

2) Variação de entalpia do vapor de água:

$$\Delta H_{w} = n_{w}Cp^{w}(T_{a} - T_{ref}) + (n_{w} - n_{wv})L_{w,j} + n_{wv}Cp^{wv}(T_{j} - T_{ref}) + (n_{w} - n_{wv})Cp_{L}^{w}(T_{j} - T_{ref})$$
(17)

Adotando-se $T_{ref} = T_j$, tem-se então que:

$$\Delta H_{w} = n_{w} C p^{w} (T_{a} - T_{j}) + (n_{w} - n_{wv}) L_{w,j}$$
⁽¹⁸⁾

Dividindo por n_{da} , tem-se:

$$\Delta H_{wv} = c_{wv} C p_{wv}^V (T_a - T_j) + (c_w - c_{wv}) L_{w,j}$$
⁽¹⁹⁾

onde Cp_{wv} é a capacidade calorífica do vapor de água e $L_{w,j}$ é o calor latente de vaporização da água na temperatura do jato.

3) Variação de entalpia do produto químico liberado:

$$\Delta H_{ch} = n_{ch} C p_{ch}^{V} (T_f - T_j) \Phi_V + n_{ch} (1 - \Phi_V) \left[\overline{Cp}_L (T_f - T_j) - L_{ch} (T_j) \right]$$
(20)

Dividindo por n_{da} , tem-se

$$\Delta H_{ch} = c_j C p_{ch}^V (T_f - T_j) \Phi_{m,f} + c_j (1 - \Phi_{m,f}) \left[\overline{C} p_{ch}^L (T_f - T_j) - L_{ch} (T_j) \right]$$
(21)

onde, Cp_{ch} e L_{ch} são o calor específico e o calor latente do produto químico, respectivamente, e $\Phi_{m,f}$ é a fração mássica de vapor na fase flash.

A densidade do jato é obtida a partir da soma das massas das fases vapor e líquida.

$$\rho_j = \frac{m_v + m_l}{V_v + V_l} \tag{22}$$

Dividindo o numerador e o denominador por n_{da} , tem-se:

$$\rho_{j} = \frac{\binom{m_{v} + m_{l}}{n_{da}}}{\binom{V_{v} + V_{l}}{n_{da}}}$$
(23)

Obtém-se os termos da Equação (23) separadamente, onde:

$$\mu_{jd} = \frac{m_v}{n_{da}} \tag{24}$$

$$\frac{m_l}{n_{da}} = (c_w - c_{wv})\mu_w \tag{25}$$

Sendo $V_v = \frac{m_v}{\rho_v}$ e $V_l = \frac{m_l}{\rho_l}$

$$\frac{V_v}{n_{da}} = \frac{m_v}{n_{da}\rho_v} = \frac{\mu_{jd}}{\rho_v}$$
(26)

$$\frac{V_{l}}{n_{da}} = \frac{m_{l}}{n_{da}\rho_{l}} = \frac{(c_{w} - c_{wv})\mu_{w}}{\rho_{l}}$$
(27)

Substituindo as Equações (24), (25), (26) e (27) em (23),

$$\rho_{j} = \frac{\mu_{jd} + (c_{w} - c_{wv})\mu_{w}}{\frac{\mu_{jd}}{\rho_{v}} + \frac{(c_{w} - c_{wv})\mu_{w}}{\rho_{l}}}$$
(28)

Dividindo por μ_{jd} ,

$$\rho_{j} = \frac{1 + (c_{w} - c_{wv}) \frac{\mu_{w}}{\mu_{jd}}}{\frac{1}{\rho_{v}} + \frac{(c_{w} - c_{wv})\mu_{w}}{\rho_{l}\mu_{jd}}}$$
(29)

onde μ_w é o peso molecular da água, $\rho_v e \rho_l$ são as densidades da mistura de vapores e da água líquida na temperatura do jato, respectivamente.

Sabendo que a razão de vapor de água condensada é obtida pela Equação (30), tem-se que a densidade do jato ρ_j é dada pela Equação (31).

$$c_{jL} = (c_w - c_{wv}) \frac{\mu_w}{\mu_{jd}}$$
(30)

$$\rho_{j} = \frac{1 + c_{jL}}{\frac{1}{\rho_{v}} + \frac{c_{jL}}{\rho_{l}}}$$
(31)

Pode-se definir uma fonte equivalente à de fase única a ser usada para qualquer modelo de jato ou modelo de dispersão, por uma velocidade uniformemente distribuída u_j.

$$u_{j} = \frac{u_{f}}{\left(1 + \frac{n_{da}}{n_{ch}}\frac{\mu_{da}}{\mu_{ch}} + \frac{n_{w}}{n_{da}}\frac{n_{da}}{n_{ch}}\frac{\mu_{w}}{\mu_{ch}}\right)}$$
(32)
$$u_{j} = \frac{u_{f}}{\left(1 + c_{j}\frac{\mu_{da}}{\mu_{ch}} + \frac{c_{w}}{c_{j}}\frac{\mu_{w}}{\mu_{ch}}\right)} \rightarrow u_{j} = \frac{u_{f}}{\left(1 + \frac{1}{c_{j}\mu_{ch}}(\mu_{da} + c_{w}\mu_{w})\right)}$$
(33)

No Yellow book a expressão para c_j é uma razão entre o produto químico liberado e a mistura ar + produto químico. Sendo assim, tem-se que:

$$c'_{j} = \frac{n_{ch}}{n_{da} + n_{ch}} \tag{34}$$

Multiplicando e dividindo por n_{da},

$$c'_{j} = \frac{\frac{n_{ch}}{n_{da}}}{1 + \frac{n_{ch}}{n_{da}}} \to c'_{j} = \frac{c_{j}}{1 + c_{j}}$$
(35)

Isolando c_j na equação anterior tem-se:

$$c'_{j}(1+c_{j}) = c_{j} \rightarrow (1-c'_{j})c_{j} = c'_{j}$$

$$c_{j} = \frac{c'_{j}}{(1-c'_{j})}$$
(36)

Substituindo a Equação (36) na (33) e sabendo que $\mu_a = \mu_{da} + c_w \mu_w$, obtém-se:

$$u_{j} = \frac{u_{f}}{\left(1 + \frac{1 - c_{j}}{c_{j}} \frac{\mu_{a}}{\mu_{ch}}\right)}$$
(37)

ANEXO A -Variação de entalpia e estado de referência

A quantidade de Energia de um sistema deve ser obtida a partir da variação de energia, quando um sistema passa de um estado para outro. Para medir esta variação, utiliza-se a Entalpia (*H*). Esta deve sempre ser dada em relação a um estado de referência (onde H = 0).

O "mais seguro" (no sentido de que ele pode sempre ser usado como um estado de referência comum) é usar os elementos em P = 1 bar e T = 298,15 K como o estado de referência padrão, ou seja, definimos H = 0 para os elementos no estado padrão à 1 bar e 298,15 K. A entalpia absoluta $H(T, P, m_i)$ é então a mudança de entalpia quando nós (1) tomamos os elementos e reagimos aos componentes de interesse (calor de formação); (2) converte para a fase real (L_{ν}), (3) aquece de 298,15 K para a temperatura real T, então (4) produz a mistura real (calor de mistura), e finalmente (5) comprime a mistura de 1 bar para a pressão atual P. Então temos que a entalpia "absoluta" é:

$$H = \Delta_1 H + \Delta_2 H + \Delta_3 H + \Delta_4 H + \Delta_5 H \tag{A.1}$$

Em mais detalhe, os termos individuais são (em base molar):

 Energia de formação (forma os componentes reais em seu estado padrão à 1 bar e 298 K a partir dos elementos em seu estado padrão à 1 bar e 298 K)

$$\Delta_1 H = \Delta_f H^0(298) = \sum_i m_i \Delta_f H_m^{0}(i,298)$$
(A.2)

Onde m_i é a quantidade do componente i e $\Delta_f H_m^{0}(i,298)$ é a entalpia para formação do componente i no seu estado padrão.

 Energia para a mudança de fase ("calor latente") (da mistura real tem um Fase a partir do "natural" de um ou mais componentes)

$$\Delta_2 H = L_{\nu}^{\ 0} = \sum_i m_i L_{\nu}^{\ 0}(i) \tag{A.3}$$

Onde $L_{v}^{0}(i)$ é a energia para mudança de fase do componente i a partir da sua fase padrão à 298 K.

3) Calor sensível, para aquecimento do componente à 1 bar, de 298 K para T:

$$\Delta_3 H = H^0(T) - H^0(298) = \sum_i m_i \int_{298}^T Cp_m(i,T) dT$$
(A.4)

 Calor de mistura (às vezes chamado de calor da solução) para formar a mistura real de seus componentes puros à temperatura T:

$$\Delta_4 H = \Delta_{mix} H \tag{A.5}$$

O calor de mistura é 0 para misturas líquidas ideais e para gases ideais. Para gases reais, o calor de mistura é normalmente incluído no termo $\Delta_5 H$ para correção de pressão e é calculado utilizando uma equação de estado.

5) Correção da pressão

$$\Delta_5 H = \int_{1bar}^{P} \left[V_m - T \left(\frac{\partial V_m}{\partial T} \right)_P \right] dP$$
(A.6)

Onde V_m é o volume molar da mistura real. Este termo é igual a 0 para gases ideais está próximo de 0 para líquidos e sólidos, uma vez que têm um volume molar muito pequeno. Para os gases reais, a correção de pressão $\Delta_5 H$ pode ser importante e pode, como mencionado, ser obtida a partir de uma equação de estado.

ANEXO B- Fluxo bifásico através de tubos

A modelagem do fluxo de duas fases em tubos visa predizer o fluxo mássico, a velocidade, a fração de mássica de vapor (qualidade) e o estado termodinâmico do fluido de saída em função das condições iniciais na extremidade a montante da tubulação.

O modelo de fluxo bifásico em tubos TPDIS foi generalizado, em particular para permitir a influência da gravidade sobre o fluxo bifásico e para incluir uma descrição mais detalhada do atrito do fluxo nas paredes do tubo. Especialmente para tipos refrigerados e semi-refrigerados de armazenamento, a gravidade pode ser um importante termo motriz.

No modelo o fluxo é dividido em três regimes:

- 1. Líquido superaquecido;
- 2. Expansão do fluxo bifásico (Não equilíbrio);
- 3. Fluido bifásico em equilíbrio.





Fonte: Bosch et. al (2005).

Para tubos muito longos o comprimento do regime 3 pode ser quase igual ao comprimento do tubo.

Assume-se que o processo é adiabático. Isto é um pressuposto razoável, uma vez que o fluxo de saída é muito rápido e a energia térmica conduzida através das paredes do tubo é portanto muito menor do que a energia de transição de fase.

Regimes de fluxo inicial (1 e 2)

Quando a condução de calor e os efeitos de atrito podem ser negligenciados, e assumindo também que o processo é isentrópico, a equação de Bernoulli pode ser escrita da seguinte forma

$$\frac{u^2}{2} = C_D^2 \left(\int v_F dP + gh_f \right) \tag{B.1}$$

Onde u, v_F e h_f são respectivamente, a velocidade, o volume específico e a altura do fluido.

Suponde que o tubo tem um furo uniforme então $q_s / A_p = u / v_F$. Para tubos muito curtos, menores que 0,1 m, pode-se assumir que a descarga de gases liquefeitos pressurizados permanece na forma líquida. Para o fluxo de líquido, o fluido é incompressível e a equação (B.1) reduz nos regimes de fluxo 1 e 2, para a forma:

$$q_{s} = C_{D} \cdot \frac{A_{p}}{v_{L}} \cdot \sqrt{\left(2\left(v_{L}\left(P_{0} - P_{2}\right) + g\Delta h_{L,2}\right)\right)}$$
(B.2)

Onde P_0 é a pressão de armazenamento, P_2 é a pressão no fim do regime de fluxo 2 e $\Delta h_{L,2}$ é a diferença de altura do tubo também neste regime. Esta equação também pode ser aplicada na estimativa de descargas de líquidos através da parede do recipiente ou através de tubos muito curtos.

Regime 3

No terceiro regime, a conservação da energia total do fluido resultará em:

$$v_F dP + d\left(\frac{u^2}{2}\right) + u^2 \cdot \frac{f_D}{2d_P} dx + g dh_L$$
(B.3)

Onde x é o comprimento ao longo do tubo.

O primeiro termo desta equação é a energia (por unidade de massa) devido à mudança de estado do fluido. O segundo termo é a energia cinética, o terceiro é referente a perda de energia devido ao atrito do fluxo contra as paredes e o quarto termo é a energia potencial.

O fator de atrito é uma função da rugosidade dividida pelo diâmetro da tubulação e o número de Reynolds e pode ser calculada conforme a Equação 5.9. O Reynolds e a viscosidade dinâmica do fluido bifásico são obtidos pelas seguintes equações.

$$\operatorname{Re} = \frac{u.d_{p}.\rho_{tp}}{\eta_{tp}} \tag{B.4}$$

$$\eta_{tp} = \eta_L \left(1 - \Phi_{m,e} \left(1 - \frac{\eta_L}{\eta_V} \right) \right)$$
(B.5)

Onde $\eta_L e \eta_V$ são a viscosidade dinâmica do líquido e do vapor, respectivamente.

Ao integrar a equação (B.3) sobre o terceiro regime, integrais insolúveis do volume específico e da densidade aparecem. Estas integrais podem ser estimadas da seguinte forma.

$$\int v_F dx = \alpha_r \cdot v_e \cdot l_p \tag{B.6}$$

$$-\int \rho_F dh_L = \beta_r . \rho_L . \Delta h_{L,3} \tag{B.7}$$

Onde $\Delta h_{L,3}$ é a diferença de altura do tubo no regime 3. Os parâmetros de razão de volume e densidade são definidos como se segue.

Se
$$0 \le l_p \le 3m$$
 $\alpha_r = \beta_r = 1 - 0.1l_p$
Se $3 < l_p \le 20m$ $\alpha_r = \beta_r = 0.7 - (l_p - 3)\frac{0.2}{17}$
Se $l_p > 20m$ $\alpha_r = \beta_r = 0.5$

A Equação (B.3) pode agora ser integrada no regime 3, usando as definições (B.6) e (B.7). Finalmente, a combinação com a equação (B.2) produz a seguinte Equação 5.8 (aqui repetida) para a densidade de fluxo de massa na saída:

$$\left(\frac{q_{s}(P_{e})}{A_{p}}\right)^{2} = \frac{(P_{0} - P_{e}) + \frac{g}{v_{L}} \left(\Delta h_{L,2} + \beta_{r} \times \Delta h_{L,3}\right)}{\left\{v_{e}\left(P_{e}\right) \times \left[1 + \frac{\left(l_{p} \times f_{D} \times \alpha_{r}\right)}{2d_{p}} + \sum \left(\frac{K_{i}\tau_{i}}{2}\right)\right] - \frac{v_{L,e}(P_{e})}{C_{D}} \left(1 - \frac{1}{2C_{D}}\right)\right\}}$$
(5.8)

O fluxo mássico críticos na saída do tubo pode ser calculado maximizando a equação acima em relação a pressão na saída P_e.

ANEXO C- Propriedades e parâmetros

Propriedade	Componente	Parâmetro				
		Α	В	С	D	Ε
$ ho_{\scriptscriptstyle L}$	Butano	0,2415	0,2948	425,2	0	0
	Propano	0,2204	0,2753	369,7	0	0
P_{v}	Butano	7,3	-1200	0	0	0
	Propano	36,007	-1,7372e3	-11,666	-8,518e-3	0
L_v	Butano	90	272,7	425,2	0,37	0
	Propano	101,8	230,9	369,7	0,38	0
C_{pL}	Butano	0,3	0,0025	-1,3e-5	2,7e-8	0
	Propano	0,3326	2,332e-3	-1,336e-5	3,016e-8	0
C_{pV}	Butano	2,266	0,079	-2,65e-5	-6,74e-10	0
	Propano	28,77	0,116	1,96e-4	-2,327e-7	6,867e-11
VL	Butano	-3,168	313,5	0	1,034e-2	-2,026e-5
	Propano	-3,372	3,135	0	1,034e-2	-2,026e-5
$V_{\rm V}$	Butano	0,3762	0,2491	9,9e-6	0	0
	Propano	4,912	0,2712	-3,806e-5	0	0
σ	Butano	22	225	425,2	1,1982	0
	Propano	22	183	369,7	1,1982	0

Tabela 11 - Parãmetros para propriedades utilizadas nas simulações.

Fonte: Yellow Book (2005) e Yaws' Handbook (2003).

Tabela 12 Parâmetros relevantes da acetona.			
Parâmetros	Valor		

i uluniti os	v uitti
Densidade da fase líquida (kg.m ⁻³)	791
Densidade do vapor (kg.m ⁻³)	2,58
Temperatura de bolha (K)	329.15
Pressão parcial (atm)	0.22
Peso Molecular (g.mol ⁻¹)	58
LEL (% em ar)	2,1

Range de Temp.(K) Parâmetro Correlação **Butano** Propano Densidade do $\rho_L = A.B^{-\left[\left(1-\frac{T}{C}\right)^{\frac{2}{7}}\right]}$ líquido 120 - 400 85,3 - 369,7(D.1) $(kg.m^{-3})$ Pressão de $\log P_V = A + \frac{B}{T} + C \cdot \log(T) + D \cdot T + E \cdot T^2 (D \cdot 2)$ 195 - 400 144 - 323 vapor (mmHg) Calor de $L_{V} = A \left[\left(\frac{C - T}{C - B} \right) \right]^{D}$ (D.3) 85,3 - 369,7vaporização 200 - 500 $(cal.g^{-1})$ Capacidade calorífica do $C_{PL} = A + B.T + C.T^2 + D.T^3$ (D.4) 120 - 400 líquido (P = 85,3 - 353 cte) $(cal.g^{-1}.K^{-1})$ Capacidade calorífica do $C_{PV} = A + B.T + C.T^2 + D.T^3 + E.T^4$ vapor (P = cte)200 - 1500 100 - 1500(D.5) $(cal.mol^{-1}K^{-1}/$ J. $mol^{-1}K^{-1}$) Viscosidade do $\log v_V = A + \frac{B}{T} + C \cdot \log(T) + D \cdot T + E \cdot T^2$ 85,3 - 369,7líquido 120 - 400 (D.6) (centipoise) Viscosidade do $v_{v} = A + B.T + C.T^{2}$ (D.7) 200 - 800 vapor 193 - 1273 (micropoise) Tensão $\sigma = A \cdot \left[\left(\frac{C - T}{C - B} \right) \right]^{D}$ (D.8) superficial 120 - 40085,3-369,7 (dynes.cm⁻¹)

Tabela 13 - Correlações para determinação das propriedades físicas e termodinâmicas dos componentes.

ANEXO D – Correlações para propriedades

Fonte: Yellow Book (2005).