

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

Natalya Amélia Bonfim de Almeida

**AVALIAÇÃO FLUIDODINÂMICA DE LIBERAÇÕES BIFÁSICAS PARA
CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS EM ATMOSFERA EXPLOSIVA: MODELAGEM
E SIMULAÇÃO**

Campina Grande, PB

Agosto de 2022

NATALYA AMÉLIA BONFIM DE ALMEIDA

**AVALIAÇÃO FLUIDODINÂMICA DE LIBERAÇÕES BIFÁSICAS PARA
CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS EM ATMOSFERA EXPLOSIVA: MODELAGEM
E SIMULAÇÃO**

Trabalho final de dissertação apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos para obtenção do título de mestre em engenharia química.

Orientador: Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves

Campina Grande, PB

Agosto de 2022

A447a Almeida, Natalya Amélia Bonfim.
Avaliação fluidodinâmica de liberações bifásicas para classificação de áreas em atmosfera explosiva: modelagem e simulação / Natalya Amélia Bonfim Almeida. – Campina Grande, 2022.
142 f.: il. color.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2022.
"Orientação: Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves".
Referências.

1. Liberações Bifásicas. 2. Fluidodinâmica Computacional (CFD). 3. Classificação de Áreas Perigosas. 4. Modelagem e Simulação. I. Alves, José Jailson Nicácio. II. Título.

CDU 544.272(043)

NATALYA AMÉLIA BONFIM DE ALMEIDA

**AVALIAÇÃO FLUIDODINÂMICA DE LIBERAÇÕES BIFÁSICAS PARA
CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS EM ATMOSFERA EXPLOSIVA: MODELAGEM
E SIMULAÇÃO**

Trabalho final de dissertação em Engenharia Química

Aprovado em: 08/08/2022

Banca Examinadora

Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves
Orientador – UAEQ – UFCG

Prof. Dr. Heleno Bispo da Silva Júnior
Avaliador interno – UAEQ – UFCG

Prof. Dr. Antônio Tavernard Pereira Neto
Avaliador Interno – UAEQ – UFCG

Prof. Dr. Andrey Oliveira de Souza
Avaliador Externo – IFPB

19/11/2022 18:39

SEI - Documento para Assinatura

Processo:

23096.050599/2022-20

Documento:

2596596



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
UNIDADE ACADEMICA DE ENGENHARIA QUIMICA
Rua Aprigio Veloso, 882, - Bairro Universitario, Campina Grande/PB, CEP 58429-900
Telefone: (83) 2101-1100
Site: <http://cct.ufcg.edu.br>

REGISTRO DE PRESENÇA E ASSINATURAS

ATA DA DEFESA PARA CONCESSÃO DO GRAU DE MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA, REALIZADA EM
08 DE AGOSTO DE 2022

(Nº 509)

CANDIDATO(A): **Natalya Amélia Bonfim de Almeida**. COMISSÃO EXAMINADORA: José Jailson Nicácio Alves, Prof., Dr., UFCG, Orientador, Heleno Bispo da Silva Júnior, Prof., Dr., UFCG, Examinador Interno, Antonio Tavernard Pereira Neto, Prof., Dr., UFCG, Examinador Interno, Andrey Oliveira de Souza, Prof., Dr., IFPB, Examinador Externo. TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: "**Avaliação Fluidodinâmica de Liberações Bifásicas para Classificação de Áreas em Atmosfera Explosiva: Modelagem e Simulação**". ÁREA DE CONCENTRAÇÃO Desenvolvimento de Processos Químicos. HORA DE INÍCIO: **16:00 Horas** – LOCAL: **Sala Virtual, em virtude da suspensão de atividades na UFCG decorrente do corona vírus**. Em sessão pública, após exposição de cerca de 50 minutos, o(a) candidato(a) foi arguido(a) oralmente pelos membros da Comissão Examinadora, tendo demonstrado suficiência de conhecimento e capacidade de sistematização, no tema de sua dissertação, obtendo conceito **APROVADO**. Face à aprovação, declara o(a) orientador, achar-se a examinada, legalmente habilitado(a) a receber o Grau de Mestre Engenharia Química, cabendo a Universidade Federal de Campina Grande, como de direito, providenciar a expedição do Diploma, a que o(a) mesmo(a) faz jus. Na forma regulamentar, foi lavrada a presente ata, que é assinada por mim, Maricé Pereira de Araújo – Secretária do PPGEQ, os membros da Comissão Examinadora e o(a) candidato(a). Campina Grande, 08 de agosto de 2022.

Maricé Pereira de Araújo

Secretária

José Jailson Nicácio Alves, Prof., Dr., UFCG

Orientador

Heleno Bispo da Silva Júnior, Prof., Dr., UFCG

Examinador Interno

Antonio Tavernard Pereira Neto, Prof., Dr., UFCG

Examinador Interno

Andrey Oliveira de Souza, Prof., Dr., IFPB

Examinador Externo

Natalya Amélia Bonfim de Almeida

Candidata



Documento assinado eletronicamente por **ANTONIO TAVERNARD PEREIRA NETO, PROFESSOR 3 GRAU**, em 08/08/2022, às 17:50, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da [Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018](#).



Documento assinado eletronicamente por **HELENO BISPO DA SILVA JUNIOR, PROFESSOR 3 GRAU**, em 08/08/2022, às 17:50, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da [Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018](#).



Documento assinado eletronicamente por **JOSE JAILSON NICACIO ALVES, PROFESSOR 3 GRAU**, em 08/08/2022, às 17:51, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da [Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018](#).



Documento assinado eletronicamente por **MARICE PEREIRA DA SILVA, SECRETÁRIA**, em 09/08/2022, às 09:39, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da [Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018](#).



Documento assinado eletronicamente por **Natalya Amelia Bonfim, Usuário Externo**, em 09/08/2022, às 11:33, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da [Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018](#).

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus por poder contemplar Sua perfeição indescritível, sabedoria inigualável, e majestade soberana cada vez que me debruço em estudar, e por poder apreciar Sua glória através das coisas e conhecimento criados, obra de Suas mãos. Pela graça e zelo derramados sobre mim ao longo do desenvolvimento deste trabalho. Glória, louvor e honra seja dada a Ele.

Agradeço ao meu esposo Matheus Andrade de Almeida pelos momentos em oração, pelo apoio, cuidado e encorajamento intensificados, pelo seu amor, compreensão e paciência que me ensinam tanto, pela sua inigualável companhia de grande valia e que muito contou durante o desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço a minha família, aos meus pais Cláudio Bonfim de Barros e Gilvaneide Amélia Bonfim por serem exemplos, por sempre acreditarem em mim, por todas as orações, apoio, incentivo e sábios conselhos, indispensáveis. À minha irmã Sahira Bonfim pelos puxões de orelha, pela preocupação e zelo comigo. A Bernardo e Samuel por serem bênçãos em nossas vidas.

Agradeço ao Prof. José Jailson Nicácio Alves por me orientar ao longo do mestrado, pela confiança, apoio, conhecimento e conselhos dados.

Agradeço ao meu amigo Claudemi Alves Nascimento, por sua amizade, orientação, conselhos, trocas de conhecimento, e boas conversas, por todo apoio e incentivo, por ter um coração tão gigante.

Agradeço aos meus amigos Paloma Lins, que transmitiu incrivelmente seu conhecimento a cerca deste trabalho e da vida, por ser um exemplo. A Ranny Rodrigues, Rodolfo Jung, Ana Gisele Alves, pelos momentos compartilhados, conselhos e apoio.

Aos professores e demais alunos que fazem parte do LENP, pelo partilhar de conhecimento, networks e orientações.

Agradeço a UFCG juntamente com o Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, pelo suporte acadêmico concedido.

Agradeço ao CNPq e a Petrobrás pelo suporte financeiro, e em especial a equipe da Petrobrás pela confiança e momentos de troca de conhecimento e avanços ao longo do desenvolvimento do projeto do qual este trabalho de dissertação é fruto.

ALMEIDA, Natalya Amélia Bonfim. **Avaliação fluidodinâmica de liberações bifásicas para classificação de áreas em atmosfera explosiva: modelagem e simulação**. 2022. 142p. Trabalho final de dissertação em Engenharia Química. Campina Grande, Universidade Federal de Campina Grande.

RESUMO

Os cenários gerados por liberações bifásicas de substâncias inflamáveis são apontados como um dos cenários mais perigosos tendo em vista as extensões e volumes elevados formados pelas nuvens de gás por vezes densas. A atenção dada a esses cenários é de grande relevância para as indústrias que lidam com o transporte e armazenamento de substâncias inflamáveis, sendo cada equipamento envolvido no processo uma possível fonte de ignição na iminência de formar uma atmosfera de gás explosivo. A aplicação da metodologia de classificação de área é uma medida necessária às indústrias a fim de mitigar ou reduzir as liberações perigosas prováveis de formar uma atmosfera explosiva, proporcionando segurança ao processo. A norma internacional IEC 60079-10-1 é uma das normas regulamentadoras da classificação de áreas de atmosferas de gás explosivo, e recomenda a aplicação da técnica de CFD para a classificação de área e avaliação de cenários complexos, além de servir de base de geração dos gráficos utilizados na norma. É de importância para a classificação de área e, conseqüentemente, para as indústrias, aprofundar a compreensão dos cenários de emissões fugitivas bifásicas, bem como entender a influência dos parâmetros que interferem nas etapas de liberação. Neste sentido, o presente trabalho tem como objetivo investigar e compreender, por meio de simulações de CFD, os cenários de liberações fugitivas bifásicas de gás propano liquefeito sob pressão visando a contribuição nos estudos de classificação de áreas e sua aplicação. Para isso, foram analisadas duas condições de fluxo que resultam em liberações bifásicas: o fluxo em equilíbrio termodinâmico e o fluxo em não-equilíbrio termodinâmico, simuladas em ambiente aberto. Uma análise de sensibilidade foi realizada para cada condição de fluxo mediante a variação da pressão de armazenamento, do diâmetro de orifício, da velocidade do vento e da altura da fonte de liberação com relação ao solo. Como resultado foram obtidos valores de extensão e volume da pluma

formada em cada caso, avaliados nas concentrações de interesse em torno do LEL da substância. A partir dos perfis traçados de extensão e volume de pluma, notou-se que a pressão é o parâmetro de menor influência sob a extensão e volume da pluma. Já a variação da altura implicou em um aumento de 99.8% na extensão da pluma quando comparado com a condição de jato livre. Foi percebido um comportamento não-monotônico no perfil de extensão e volume com a variação da velocidade do vento a favor e contra fluxo de liberação, onde em alguns casos um espalhamento lateral da pluma ocorreu com o maior alcance detectado não no plano de simetria, mas ao longo do domínio. Na maioria dos casos a classificação foi do tipo Zona 2 tendo em vista o grau de liberação secundário considerado. Os resultados de extensão utilizando a norma IEC 60079-10-1 foram, em sua maioria, maiores do que os obtidos em CFD, correspondendo numa média geral a 1.6 vezes a extensão em CFD nos casos do fluxo em equilíbrio, e 1.9 vezes para o fluxo em não equilíbrio.

Palavras-chave: Liberações bifásicas; Fluidodinâmica computacional (CFD); Classificação de áreas perigosas; Modelagem e simulação.

ALMEIDA, Natalya Amélia Bonfim. **Avaliação fluidodinâmica de liberações bifásicas para classificação de áreas em atmosfera explosiva: modelagem e simulação**. 2022. 142p. Trabalho final de dissertação em Engenharia Química. Campina Grande, Universidade Federal de Campina Grande.

ABSTRACT

The scenarios generated by two-phase releases of flammable substances are pointed out as one of the most dangerous scenarios given the extent and high volumes formed by the sometimes dense gas clouds. The attention given to these scenarios is of great relevance for industries that deal with the transport and storage of flammable substances, with each piece of equipment involved in the process being a possible ignition source on the verge of forming an explosive gas atmosphere. The application of area classification methodology is a necessary measure for industries to mitigate or reduce hazardous releases likely to form an explosive atmosphere, providing process safety. The international standard IEC 60079-10-1 is one of the regulatory standards for the classification of areas of explosive gas atmospheres and recommends the application of the CFD technique for area classification and evaluation of complex scenarios, in addition to serving as a basis for the graphics generation presented in the standard. It is important for area classification and, consequently, for industries, to deepen the understanding of two-phase fugitive emissions scenarios, as well as to understand the influence of parameters that interfere in the release steps. In this sense, the present work aims to investigate and understand, through CFD simulations, the scenarios of two-phase fugitive releases of liquefied propane gas under pressure, aiming to contribute to the area classification studies and application. For this, two flow conditions that result in two-phase releases were analyzed: the flow in thermodynamic equilibrium and the flow in non-thermodynamic equilibrium, simulated in an open environment. A sensitivity analysis was performed for each flow condition by varying the storage pressure, orifice diameter, wind speed, and the height of the release source relative to the ground. As a result, values of extent and volume of the plume formed in each case were obtained and evaluated at the concentrations of interest around the substance LEL. From the profiles traced of plume extension and volume, it was

noticed that the pressure is the parameter with the least influence on the plume extent and volume. Since with the height variation, there was an increase of 99.8% in the extent when compared to the free jet condition. A non-monotonic behavior in the extent and volume profile was noticed with the variation of the wind speed in favor and against the release flow, where in some cases a lateral scattering of the plume occurred with the greatest reach detected not in the symmetry plane, but along the domain. In most cases, the classification was Zone 2 type, considering the secondary release degree used. The extent results using the IEC 60079-10-1 standard were, in most cases, higher than those obtained in CFD, corresponding to a general average of 1.6 times the CFD extent for equilibrium flow cases, and 1.9 times for nonequilibrium flow.

Key-words: Two-phase releases; Computational fluid dynamics (CFD); Hazardous areas classification; Modeling and simulation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2-1 – Classificação do tipo de zona, Tabela D.1 da IEC 60079-10-1....	28
Figura 2-2 - Gráfico para estimativa da extensão da área perigosa.....	30
Figura 2-3 - Gráfico para avaliar o grau de diluição com base na liberação característica e na velocidade do vento.	33
Figura 2-4 – Formas de liberação sua natureza geral.....	35
Figura 2-5 – Alguns dos mecanismos de liberação concebíveis.....	37
Figura 2-6 - Curva de saturação do cloro.....	40
Figura 2-7 - Regime de fluxo bifásico assumido para um modelo de descarga.	42
Figura 2-8 - Esquema das etapas de uma liberação de jato bifásico.....	44
Figura 2-9 – Liberação da substância, efeito da flutuabilidade positiva ou negativa da pluma, e as dominâncias no processo de dispersão.....	47
Figura 3-1 - Etapas de uma liberação bifásica e parâmetros associados a cada etapa para a definição do cenário de liberação.....	50
Figura 3-2 – Imagens de uma simulação de quebra de gota no regime <i>bag breakup</i> para uma corrente de ar da esquerda para a direita.	62
Figura 3-3 - Imagens de uma simulação de quebra de gota no regime <i>stripping breakup</i> para uma corrente de ar da esquerda para a direita.	62
Figura 4-1 - Domínio computacional e suas respectivas condições de contorno (figura ilustrativa das condições de contorno).	67
Figura 4-2 - Vista da geometria construída.	67
Figura 4-3 - Parte da malha gerada, e o refinamento aplicado nas proximidades do orifício e do solo.	68
Figura 6-1 - Perfis de temperatura e de velocidade da fase vapor ao longo do eixo central de liberação.	80

Figura 6-2 - Perfil de temperatura da fase vapor ao longo do eixo central de liberação.....	82
Figura 6-3 – Perfis de (a) temperatura do gás contendo os dados experimentais FLIE-INERIS, (b) temperatura da gotícula líquida, e (c) perfil de velocidade do gás.	83
Figura 6-4 – Resultados das plumas na condição de equilíbrio para os Casos 2 e 4, respectivamente: (a) e (c) volume da pluma em $\frac{1}{4}$ LEL, e (b) e (d) contornos da pluma para cada concentração de interesse (LEL, $\frac{1}{2}$ LEL e $\frac{1}{4}$ LEL) avaliados no plano de simetria.	87
Figura 6-5 - Casos 2 (a e b) e 4 (c e d) na condição de não-equilíbrio, respectivamente: (a) e (c) volume da pluma em $\frac{1}{4}$ LEL, e (b) e (d) contornos da pluma para cada concentração de interesse (LEL, $\frac{1}{2}$ LEL e $\frac{1}{4}$ LEL) avaliados no plano de simetria.	89
Figura 6-6 - Vista superior dos volumes das plumas em $\frac{1}{4}$ LEL nos casos (a) 2 e (b) 4, respectivamente, na condição de não-equilíbrio.....	90
Figura 6-7 – Perfis dos modelos de regressão para a extensão e o volume da pluma versus o parâmetro da análise de sensibilidade (condição de não-equilíbrio), sendo, respectivamente: (a) e (b) pressão, (c) e (d) diâmetro do orifício de liberação, (e) e (f) velocidade do vento, (g) e (h) altura da fonte de liberação ao solo, (i) e (j) concentração da nuvem em mol/mol.	92
Figura 6-8 - Perfil da extensão e do volume da pluma de propano frente a influência da velocidade do vento para um maior número de pontos simulados – fonte a 2.0 m e condição de jato livre.....	98
Figura 6-9 – Perfis dos modelos de regressão para a extensão e o volume da pluma versus o parâmetro da análise de sensibilidade (condição de equilíbrio), sendo, respectivamente: (a) e (b) pressão, (c) e (d) diâmetro do orifício de liberação, (e) e (f) velocidade do vento, (g) e (h) altura da fonte de liberação ao solo, (i) e (j) concentração da nuvem em mol/mol.....	101
Figura 6-10 - Extensão da nuvem de gás de propano resultante de uma liberação bifásica sob o efeito da velocidade do vento avaliados nas concentrações do (a) LEL, (b) 0.5LEL e (c) 0.25LEL.....	107

Figura 6-11 - Quatro diferentes cenários do comportamento da pluma frente a ação da velocidade do vento. Dados avaliados em $\frac{1}{4}$ LEL.	108
Figura 6-12 – Perfil da velocidade da nuvem de gás ao longo do eixo central de liberação para o vento no sentido oposto ao jato de liberação.....	109
Figura 6-13 - Volume da nuvem de gás de propano resultante de uma liberação bifásica sob o efeito da velocidade do vento avaliados nas concentrações do (a) LEL, (b) 0.5LEL e (c) 0.25LEL.....	110
Figura 6-14 - Comportamento da pluma frente a velocidade do vento de -2 m/s. (a) vista em perspectiva e (b) vista superior, ilustrando o espalhamento lateral da pluma.	111
Figura 6-15 - Determinação do grau de diluição para a liberação na condição de (a) equilíbrio e de (b) não-equilíbrio.	113
Figura 6-16 – Definição da extensão perigosa baseado no diagrama da norma IEC 60079-10-1 (2020) para os fluxos (a) em equilíbrio termodinâmico e (b) em não-equilíbrio termodinâmico, avaliados em $\frac{1}{2}$ LEL.....	120

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 - Coeficientes utilizados no modelo SST e seus respectivos valores.	59
Tabela 4.1 - Configuração das condições de contorno.	70
Tabela 4.2 - Condições de contorno no pós-expansão.	71
Tabela 4.3 - Análise de dependência de malha	72
Tabela 5.1 - Valores dos parâmetros de entrada na condição de pós-expansão.	74
Tabela 5.2 - Valores dos parâmetros nas condições de armazenamento e de pós-expansão (Caso 1).	75
Tabela 5.3 - Valores dos parâmetros nas condições de armazenamento e de pós-expansão (Caso 2).	76
Tabela 5.4 - Valores dos parâmetros que caracterizam a liberação e o pós- expansão dada a condição do jato no orifício.	77
Tabela 5.5 - Intervalo dos parâmetros de entrada para a análise de sensibilidade.	78
Tabela 6.1 - Extensão e volume da nuvem de gás butano formada no Caso 2.	84
Tabela 6.2 - Valores de extensão e volume da nuvem de gás referente aos casos da Tabela 5.4.	86
Tabela 6.3 – Efeito do solo visualizado pela diferença entre as extensões e volumes dos casos variando altura frente a condição de jato livre.....	97
Tabela 6.4 - Equações obtidas pela análise de sensibilidade avaliada na concentração de 0.5LEL.	100
Tabela 6.5 - Equações obtidas pela análise de sensibilidade avaliada para a condição de equilíbrio na concentração de 0.5LEL.....	106

Tabela 6.6 - Classificação de área baseada na IEC 60079-10-1 (2020) para a liberação bifásica de propano na condição de equilíbrio termodinâmico no orifício de liberação. Concentração de análise: ½ LEL.....	115
Tabela 6.7 – Classificação de área baseada na IEC 60079-10-1 (2020) para a liberação bifásica de propano na condição de não-equilíbrio no orifício de liberação. Concentração de análise: ½ LEL.....	117
Tabela 6.8 – Extensão perigosa da área classificada observada para a condição de equilíbrio termodinâmico, em ½ LEL.....	118
Tabela 6.9 - Extensão perigosa da área classificada observada para a condição de não-equilíbrio, nem ½ LEL.....	119

LISTA DE SÍMBOLOS GREGOS

Símbolo	Descrição
λ	Condutividade térmica do fluido
μ_F	Viscosidade da fase contínua
μ_t	Viscosidade turbulenta
ν	Viscosidade cinemática
ρ	Densidade da mistura
ρ_F	Densidade do fluido
ρ_g	Densidade do gás ou vapor
$\rho_{g,o}$	Densidade do gás no orifício
$\rho_{l,o}$	Densidade do líquido no orifício
$\rho_{m,o}$	Densidade de mistura no orifício
ρ_p	Densidade da partícula
σ	Tensão superficial
τ	Tensor tensão

LISTA DE ABREVIATURAS

Símbolo	Descrição
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
IEC	<i>International Electrotechnical Commission</i>
INERIS	<i>Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques</i>
LEL	<i>Lower Explosive Limit</i>
NBR	Norma Brasileira
RMS	<i>Root Mean Square</i>

SUMÁRIO

<u>CAPÍTULO 1</u>	<u>INTRODUÇÃO</u>	<u>20</u>
1.1	JUSTIFICATIVA	20
1.2	OBJETIVOS	22
1.2.1	OBJETIVOS GERAIS	22
1.2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	22
1.3	ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	23
<u>CAPÍTULO 2</u>	<u>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</u>	<u>25</u>
2.1	CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS	25
2.2	NORMA IEC 60079-10-1	26
2.2.1	ZONA E EXTENSÃO	27
2.2.2	GRAU DE LIBERAÇÃO	31
2.2.3	GRAU DE DILUIÇÃO	31
2.2.4	DISPONIBILIDADE DE VENTILAÇÃO	33
2.2.5	FORMAS DE LIBERAÇÃO	34
2.3	CENÁRIOS E ETAPAS DE LIBERAÇÃO	35
2.3.1	EMISSÃO	36
2.3.2	EXPANSÃO E FLASHING	43
2.3.3	ENTRAINMENT	44
2.3.4	DISPERSÃO	45
<u>CAPÍTULO 3</u>	<u>MODELO MATEMÁTICO</u>	<u>49</u>
3.1	JATO DE LIBERAÇÃO	49
3.2	MODELO CFD	54
3.2.1	ABORDAGEM EULERIANA-LAGRANGEANA	54
3.2.2	MODELO DE ARRASTE E DE EMPUXO	57
3.2.3	MODELO DE TURBULÊNCIA	57
3.2.4	MODELOS DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR E QUEBRA DE GOTA	61
3.2.5	MODELO DE EVAPORAÇÃO DE LÍQUIDO	64

<u>CAPÍTULO 4</u>	<u>METODOLOGIA</u>	65
4.1	MODELAGEM NUMÉRICA	65
4.1.1	DOMÍNIO COMPUTACIONAL E MALHA	65
4.1.2	CONFIGURAÇÃO DA SIMULAÇÃO	69
4.1.3	ESTUDO DE DEPENDÊNCIA DE MALHA	70
<u>CAPÍTULO 5</u>	<u>ESTUDOS DE CASO</u>	73
5.1	VALIDAÇÃO DO MODELO DE CFD	74
5.1.1	COLDRICK (2016)	74
5.1.2	PROJETO FLIE – INERIS	75
5.2	ANÁLISE DAS LIBERAÇÕES BIFÁSICAS: EQUILÍBRIO E NÃO-EQUILÍBRIO	77
5.3	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE PARA LIBERAÇÕES BIFÁSICAS	78
<u>CAPÍTULO 6</u>	<u>RESULTADOS E DISCUSSÕES</u>	79
6.1	VALIDAÇÃO DO MODELO	80
6.1.1	COLDRICK (2016)	80
6.1.2	PROJETO FLIE – INERIS	81
6.2	ANÁLISE DAS LIBERAÇÕES BIFÁSICAS – CONDIÇÕES DE EQUILÍBRIO E DE NÃO-EQUILÍBRIO	86
6.3	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE – CONDIÇÕES DE EQUILÍBRIO TERMODINÂMICO E DE NÃO-EQUILÍBRIO	91
6.3.1	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE: CONDIÇÃO DE NÃO-EQUILÍBRIO	91
6.3.2	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE: CONDIÇÃO EQUILÍBRIO TERMODINÂMICO	100
6.4	EFEITO DO SOLO E DA VELOCIDADE DO VENTO NO CENÁRIO DE UMA LIBERAÇÃO BIFÁSICA	106
6.5	CLASSIFICAÇÃO DE ÁREA: CFD vs IEC 60079-10-1	111
<u>CAPÍTULO 7</u>	<u>CONCLUSÕES</u>	123
7.1	CONCLUSÕES	123
7.2	SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS	125

REFERÊNCIAS **126**

ANEXO **131**

CAPÍTULO 1 INTRODUÇÃO

CAPÍTULO 1	INTRODUÇÃO	20
1.1	JUSTIFICATIVA	20
1.2	OBJETIVOS	22
1.2.1	OBJETIVOS GERAIS	22
1.2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	22
1.3	ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	23

1.1 JUSTIFICATIVA

Implicações graves podem ocorrer devido a formação de nuvens de gases inflamáveis liberados na atmosfera, seja por uma liberação fugitiva ou por uma ruptura em um equipamento que armazena ou transporta tais tipos de substância. Segundo descreve a *International Labour Organization* (2004), agência das Nações Unidas, a formação de nuvens de vapor devido a liberação de substâncias inflamáveis quando em contato com uma fonte de ignição resulta em incêndio ou explosão, e, a depender da velocidade e direção do vento e da extensão da nuvem de gás avaliada na concentração limite, a área afetada poderá ser da ordem de centenas de metros.

O cenário apresentado anteriormente retrata uma liberação acidental. Porém, em um contexto onde a liberação é fugitiva, ou seja, vazamentos muito pequenos, existe um potencial para a formação de uma atmosfera de gás explosivo. Neste caso, faz-se necessário aplicar o método de classificação de áreas de risco que tem como finalidade verificar e classificar áreas prováveis de forma uma atmosfera de gás explosivo. Nesta metodologia as áreas são classificadas por tipos de zona e faz-se necessário, também, a determinação da extensão que esta zona ocupa.

Normas regulamentadoras para a classificação de áreas de risco, como a norma internacional IEC 60079-10-1, fornecem os critérios necessários para serem avaliados os riscos de ignição, bem como as diretrizes para realizar a classificação da área. A partir da classificação de área é possível reduzir a classificação do tipo de zona e conseqüentemente o risco de ignição, por meio do dimensionamento devido dos setores industriais e da seleção, instalação e operação adequada dos equipamentos conforme a norma a ser seguida (IEC 60079-10-1, 2020).

A fim de corroborar com o estudo de classificação de áreas, a aplicação de técnicas numéricas como a Fluidodinâmica Computacional (CFD), surge como uma alternativa para a classificação de área principalmente quando se trata de cenários envolvendo a interação de múltiplos fatores. A norma IEC 60079-10-1 (2020) recomenda a utilização da técnica de CFD, dentre as aplicações mencionadas pela norma estão aquelas que envolvem a ação da velocidade do vento, bem como às que abrangem plantas complexas cujos equipamentos presentes podem interferir na ventilação do ambiente.

Tratar com liberações bifásicas compreendem cenários que estão diretamente relacionados às condições de armazenamento, às condições do ambiente para onde a substância inflamável é liberada, à substância liberada e suas características físico-químicas, à posição do orifício de liberação no equipamento, dentre outros fatores. Cada, parâmetro envolvido na liberação interfere nas características do jato liberado, na nuvem de gás formada, e, conseqüentemente, na extensão e volume desta nuvem, e se haverá ou não a presença de poças evaporativas.

São poucos os trabalhos presentes na literatura que possui a abordagem da classificação de áreas dada a sua importância, e menos ainda aqueles que tratam de liberações bifásicas. Mediante os fatores que interferem num cenário de liberação de uma substância inflamável, e a fim de contribuir com os estudos de classificação de áreas com ênfase em liberações bifásicas, o presente trabalho propõe o estudo de liberações bifásicas via fluidodinâmica computacional. A finalidade do estudo é possibilitar o entendimento de uma liberação bifásica, bem como dos fatores que influenciam na liberação e na nuvem de gás formada a partir da liberação, e poder observar a luz da norma

IEC 60079-10-1 (2020) como funciona a classificação e o que ela aborda e não aborda, simulando os cenários de liberação através da técnica de CFD.

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Objetivos Gerais

Este trabalho tem o objetivo de investigar e compreender via CFD os cenários de liberações bifásicas de propano decorrentes de emissões fugitivas do gás liquefeito pressurizado, e avaliar a sensibilidade do fenômeno frente a variação de parâmetros de influência e as implicações na classificação de áreas.

1.2.2 Objetivos específicos

- Compreender o fenômeno de liberação bifásica de um gás liquefeito pressurizado e os possíveis cenários envolvidos;
- Modelar e simular os casos em estudo, e a partir das simulações obter resultados como a extensão e o volume da nuvem de gás formada;
- Validar a modelagem em CFD com dados disponíveis na literatura;
- Examinar os cenários gerados pelas condições de fluxo no orifício de liberação: em equilíbrio termodinâmico e em não-equilíbrio;
- Realizar uma análise de sensibilidade com relação aos parâmetros que influenciam a liberação bifásica em cada condição de liberação em estudo;
- Extrair modelos de regressão que apontem a influência dos parâmetros em estudo na extensão e no volume da nuvem de gás formada;
- Aprofundar a análise do efeito do solo, altura da fonte de liberação e velocidade do vento;
- Simular alguns cenários nos softwares Quadvent 2 e EFFECTS, para fins de comparação com as simulações desenvolvidas em CFD;
- Realizar a classificação de área utilizando a norma internacional IEC 60079-10-1 (2020) e comparar com os resultados obtidos nas simulações em CFD.

1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

O presente trabalho de dissertação encontra-se dividido em sete capítulos, sendo este primeiro capítulo introdutório contendo uma visão geral do que será abordado mais detalhadamente ao longo do trabalho, além da exposição dos objetivos e estrutura do trabalho.

No Capítulo 2 está disposta a fundamentação teórica. Neste capítulo estão reunidos conceitos e definições necessários ao que tange a classificação de áreas perigosas, e a compreensão do fenômeno de liberação bifásica, percorrendo cada etapa que os compõe.

No Capítulo 3 encontra-se detalhada a modelagem matemática empregada no desenvolvimento do presente trabalho. Neste capítulo são descritos os modelos de estimativa de parâmetros para as simulações em CFD, e os modelos empregados em CFD para simular o fenômeno da liberação bifásica, e como funcionam.

No Capítulo 4 é apresentada a metodologia aplicada no desenvolvimento deste trabalho. Neste capítulo estão descritos os métodos e softwares utilizados no desenvolvimento das simulações em CFD, e são apresentados o domínio computacional, a configuração das simulações e a malha computacional.

No Capítulo 5 estão detalhados os casos desenvolvidos na forma de estudos de casos que foram realizados ao longo do trabalho. Em cada estudo de caso estão as condições de contorno e seus valores.

No Capítulo 6 contém os resultados obtidos a partir da metodologia empregada conforme os estudos de caso apontados no capítulo anterior. Aqui são reportados os resultados extraídos das simulações CFD e desenvolvidos para as duas condições de fluxo no orifício. São apresentados e discutidos os comportamentos de pluma, os perfis de extensão e volume de pluma traçados conforme o parâmetro em análise, e, por fim, a classificação de áreas baseada nos casos desenvolvidos empregando a norma IEC 600079-10-1 (2020) e comparando com o obtido em CFD.

No Capítulo 7 estão pontuadas as conclusões extraídas deste trabalho, e algumas recomendações para trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

<u>CAPÍTULO 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</u>	<u>25</u>
2.1 CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS	25
2.2 NORMA IEC 60079-10-1	26
2.2.1 ZONA E EXTENSÃO	27
2.2.2 GRAU DE LIBERAÇÃO	31
2.2.3 GRAU DE DILUIÇÃO	31
2.2.4 DISPONIBILIDADE DE VENTILAÇÃO	33
2.2.5 FORMAS DE LIBERAÇÃO	34
2.3 CENÁRIOS E ETAPAS DE LIBERAÇÃO	35
2.3.1 EMISSÃO	36
2.3.1.1 Liberação Bifásica	39
2.3.2 EXPANSÃO E FLASHING	43
2.3.3 ENTRAINMENT	44
2.3.4 DISPERSÃO	45

2.1 CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS

A classificação de áreas de risco surgiu da necessidade de controlar fontes de ignição em ambientes contendo gás inflamável. A fim de realizar tal controle, foi inicialmente desenvolvido um invólucro à prova de chamas para aparelhos eletrônicos em 1926 na Grã-Bretanha pelo *British Standard Institution*. Este equipamento foi desenvolvido em vista da presença de uma atmosfera inflamável de metano observada na indústria de mineração de carvão. Posteriormente, o invólucro foi aprimorado para abranger outros gases e vapores inflamáveis. Em 1948 a *British Standard Institution* prosseguiu para o desenvolvimento do primeiro código de práticas para aplicar à outras indústrias. Neste código é abordado o uso de equipamentos à prova de chamas e de equipamentos intrinsecamente seguros. Além da Grã-Bretanha, pode-se

destacar também os Estados Unidos com seus primeiros trabalhos desenvolvidos na área pela *American Petroleum Institute* (API) (COX, LEES e ANG, 1990).

Existem atualmente várias normas regulamentadoras para a classificação de áreas de risco. Alguns exemplos podem ser mencionados como as normas europeias IEC 60079-10-1 na Nova Zelândia e Austrália, Guide CEI 31-35 na Itália, DGUV-Regel 113-001 na Alemanha, *Klassning av explosionsfarliga områden* na Suécia, SUVA Merkblatt Nr. 2153 na Suíça, as normas americanas API RP505 e NFPA 497, a norma brasileira ABNT NBR IEC 60079-10-1, a norma indiana OISD 113 e a canadense CSA C22.1. Cada país se norteia pelas recomendações das normas vigentes (OLIVEIRA, 2018; IEC 60079-10-1, 2020). Neste trabalho será dada ênfase à norma internacional IEC 60079-10-1, utilizada pela norma brasileira.

A classificação de área corresponde a um método que analisa e classifica áreas prováveis de ocorrer uma atmosfera de gás explosivo, possibilitando a seleção, instalação e operação apropriada dos equipamentos, e desta forma a segurança do processo. Para isso, algumas normas classificam as áreas por tipo de zona e a extensão desta zona, já outras, no lugar de definir zonas aplicam as denominadas divisões. Tais determinações exigem a identificação da fonte de liberação, da substância inflamável liberada e suas propriedades físicas, do grau, taxa e velocidade de liberação, e dos fatores relacionados às condições atmosféricas como a presença de ventilação, dentre outros fatores (IEC 60079-10-1, 2020).

2.2 NORMA IEC 60079-10-1

Como mencionado no tópico anterior, a norma internacional IEC 60079-10-1 (2020), adotada neste trabalho, tem como base de classificação a definição do tipo de zona e sua extensão. Segundo a norma, para a determinação do tipo de zona faz-se necessário conhecer o grau de liberação da fonte que pode ser dividido em contínuo, primário e secundário. Em seguida define-se a efetividade da ventilação, ou grau de diluição, presente no ambiente e é dividida em alta,

média ou baixa. Por fim, a disponibilidade de ventilação caracterizada em boa, satisfatória e pobre. Com a determinação de tais parâmetros é possível obter o tipo de zona que a área possui. Quanto a extensão da zona, a norma fornece um diagrama para determiná-la. Para uma melhor compreensão cada fator mencionado será abordado nos tópicos seguintes.

É mencionado na norma que na presença de exemplos de classificação em códigos industriais ou padrões nacionais que sejam claramente demonstrados para ser aplicado em uma situação particular, estes podem ser aceitos. Também relata que, quando apropriado, pode-se realizar a combinação de códigos industriais e padrões nacionais na classificação de áreas de fábricas maiores (IEC 60079-10-1, 2020).

Além da classificação de área por meio de normas nacionais e/ou códigos industriais, a IEC 60079-10-1 também recomenda o uso da fluidodinâmica computacional (CFD). A aplicação da técnica de CFD se dá principalmente em casos que ocorre a interação de múltiplos fatores, como também àqueles que envolve plantas complexas devido a quantidade de equipamentos na área que podem interferir na ventilação do ambiente. As simulações em CFD permite uma avaliação detalhada e precisa quando modelada corretamente.

Os tópicos a seguir trarão à compreensão os critérios e termos utilizados na classificação de áreas a partir da IEC 60079-10-1 e aplicados ao longo deste trabalho.

2.2.1 Zona e Extensão

A norma define a zona de uma área conforme a frequência de ocorrência e duração da atmosfera explosiva. Uma área pode ser classificada em Zona 0, Zona 1, Zona 2 e Área Não Perigosa, ou área não classificada como reportado na norma ABNT IEC 60079-10-1 (2019). Elas são descritas como:

- Zona 0: área onde a presença de uma atmosfera explosiva é contínua ou ocorre por longos períodos de tempo ou frequentemente;

- Zona 1: área provável de ocorrer uma atmosfera de gás explosivo com uma frequência periódica ou eventualmente, em condições normais de operação;
- Zona 2: área que não é provável de ocorrer uma atmosfera de gás explosivo em condições normais de operação, caso ocorra, a atmosfera existirá por um curto período;
- Área não perigosa: área que não se espera a presença de uma atmosfera explosiva de gás em concentrações onde seja demandado cuidados especiais quanto aos critérios de classificação relacionados a seleção, instalação e operação de equipamentos, e construção.

No documento da norma IEC 60079-10-1 (2020) é disponibilizada uma tabela (Figura 2-1) utilizada para realizar a identificação do tipo de zona para a classificação da área. Para esta finalidade, faz-se necessário identificar o grau de liberação, o grau de diluição e a disponibilidade de ventilação.

Figura 2-1 – Classificação do tipo de zona, Tabela D.1 da IEC 60079-10-1.

Grade of release	Effectiveness of Ventilation						
	High Dilution			Medium Dilution			Low Dilution
	Availability of ventilation						
	Good	Fair	Poor	Good	Fair	Poor	Good, fair or poor
Continuous	Non-hazardous (Zone 0 NE) ^a	Zone 2 (Zone 0 NE) ^a	Zone 1 (Zone 0 NE) ^a	Zone 0	Zone 0 + Zone 2 ^c	Zone 0 + Zone 1	Zone 0
Primary	Non-hazardous (Zone 1 NE) ^a	Zone 2 (Zone 1 NE) ^a	Zone 2 (Zone 1 NE) ^a	Zone 1	Zone 1 + Zone 2	Zone 1 + Zone 2	Zone 1 or zone 0 ^e
Secondary^b	Non-hazardous (Zone 2 NE) ^a	Non-hazardous (Zone 2 NE) ^a	Zone 2	Zone 2	Zone 2	Zone 2	Zone 1 and even Zone 0 ^d
^a Zone 0 NE, 1 NE or 2 NE indicates a theoretical zone which would be of negligible extent under normal conditions. ^b The Zone 2 area created by a secondary grade of release may exceed that attributable to a primary or continuous grade of release; in this case, the greater distance should be taken. ^c Zone 1 is not needed here. I.e. small Zone 0 is in the area where the release is not controlled by the ventilation and larger Zone 2 for when ventilation fails. ^d Will be Zone 0 if the ventilation is so weak and the release is such that in practice an explosive gas atmosphere exists virtually continuously (i.e. approaching a 'no ventilation' condition). '+' signifies 'surrounded by'. Availability of ventilation in naturally ventilated enclosed spaces is commonly not considered as good.							

Fonte: IEC 60079-10-1 (2020).

Conforme a Figura 2-1, o termo NE configura uma zona que possui extensão desprezível, e no caso de haver uma ignição esta terá consequências também

insignificantes. Alguns critérios são especificados na norma para a classificação de zona NE. Dentre os fatores que podem levar uma área a se tornar NE encontra-se a taxa de liberação associado ao grau de liberação, e o grau de ventilação alto que propicia uma elevada diluição resultando em redução da concentração e assim extensões desprezíveis em torno do LEL (IEC 60079-10-1, 2020; TOMMASINI, 2013).

A extensão de uma zona corresponde a distância estimada ou calculada partindo da fonte de liberação até onde a mistura ar/gás esteja a uma concentração abaixo do limite inferior de inflamabilidade (LEL – *Lower Explosive Limit*). A extensão de uma zona é influenciada pela taxa de liberação, pelas propriedades da substância liberada, geometria do orifício de liberação, presença ou não de obstruções próximo ao ponto de liberação, ventilação disponível e sua capacidade de diluição, dentre outros parâmetros de processo e do ambiente (IEC 60079-10-1, 2020).

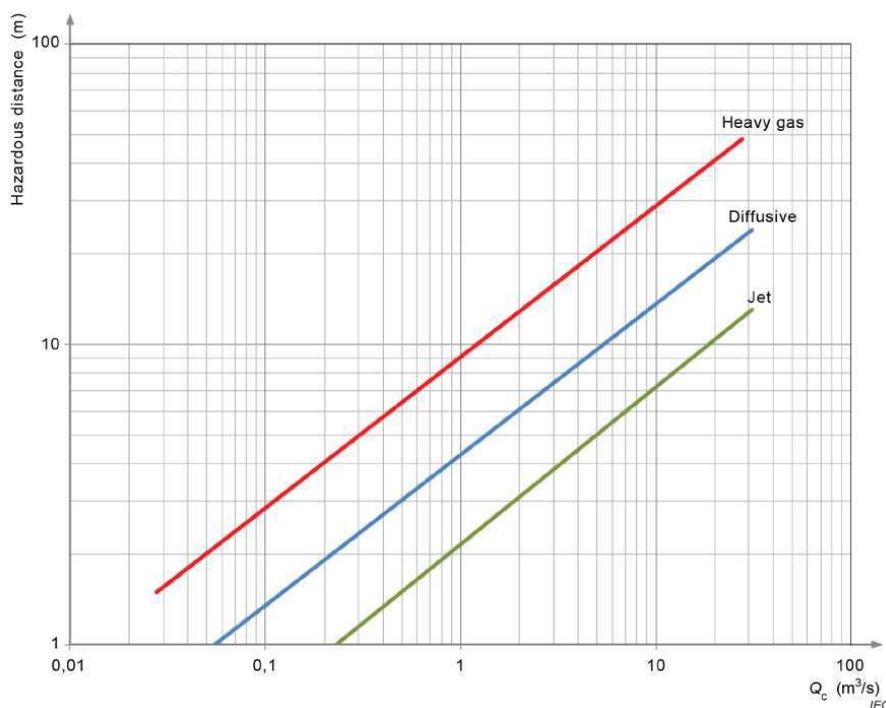
Para a determinação da extensão, a norma sugere o uso de um gráfico fornecido em seu documento, gerado com base em simulações em CFD. O gráfico encontra-se representado na Figura 2-2, e para a estimativa da extensão faz-se necessário o cálculo da liberação característica volumétrica:

$$Q_c = \frac{W_g}{\rho_g LIE} \quad (2.1)$$

Onde, W_g corresponde a taxa de liberação mássica da substância inflamável, e ρ_g a densidade do gás ou vapor nas condições ambientes, calculada conforme Eq.(2.2).

$$\rho_g = \frac{p_a M}{RT_a} \quad (2.2)$$

Figura 2-2 - Gráfico para estimativa da extensão da área perigosa.



Fonte: IEC 60079-10-1 (2020).

Partindo da Figura 2-2, após o cálculo da liberação característica, deve-se selecionar a linha que melhor descreve o tipo de liberação esperado na área a ser classificada. Cada linha representa um tipo de liberação, e elas são definidas como jato, difusivo e gás pesado. A liberação do tipo jato é definida como um jato não impedido com altas velocidades, caracterizada por ser uma liberação do tipo *choked*, ou seja, de fluxo crítico. A liberação difusa possui a característica de uma liberação subsônica, com baixas velocidades, ou de uma liberação cuja perda de momento decorre da geometria do orifício de liberação ou da presença de alguma superfície próxima a fonte de liberação. A liberação de gás ou vapor pesado, como o nome sugere, corresponde a liberação de gases ou vapores pesados que se caracteriza por um espalhamento horizontal da nuvem formada ao longo da superfície (IEC 60079-10-1, 2020).

2.2.2 Grau de liberação

O grau de liberação de uma fonte será identificado pela frequência de ocorrência e/ou duração da liberação da substância inflamável. São três os graus de liberação:

- Grau contínuo: esperado que ocorra continua ou frequentemente, ou por longos períodos (Ex.: substância inflamável armazenada em um tanque aberto, encontrando-se exposta a atmosfera continuamente ou por longos períodos);
- Grau primário: esperado que ocorra periodicamente ou ocasionalmente, durante operação normal (Ex.: válvulas de alívio, respiradouros, pontos de amostragem que podem ou devem liberar substâncias inflamáveis durante a operação normal do processo);
- Grau secundário: não é esperado que ocorra em operação normal, caso ocorra, será não frequente e por curtos períodos (Ex.: selos de bombas, compressores, válvulas, flanges, conexões, acessórios de tubulação).

2.2.3 Grau de diluição

O grau de diluição indica a capacidade que uma atmosfera possui de diluir uma liberação até uma concentração que seja segura. Esta capacidade advém das condições da atmosfera do local, tendo em vista a disponibilidade de ventilação. Um outro fator que é determinante na avaliação do grau de diluição é a natureza da fonte de liberação e o tipo liberação. Uma vez que a taxa de liberação é elevada e considerada contínua, o grau de diluição provavelmente será baixo dadas as condições atmosféricas. Na ausência de movimento do ar, em virtude de sua expansão o *entrainment* do próprio jato realiza a diluição.

Algumas técnicas de diluição podem ser mencionadas, como a cortina de ar e vapor que atua com o intuito de impedir o espalhamento da nuvem de gás ou vapor para outras áreas, isso porque funciona como barreira física; da mesma forma o spray ou cortina de água. Outras barreiras utilizadas são a cortina térmica, a barreira de vapor ou vedação. Todas estas técnicas são aplicadas

visando aumentar a taxa de diluição seja para a quebra de aerossóis ou para evitar que as nuvens de gás ou vapor inflamável cheguem a outras áreas, tendo como foco o controle da atmosfera de gás explosivo (IEC 60079-10-1, 2020; CCPS, 1997).

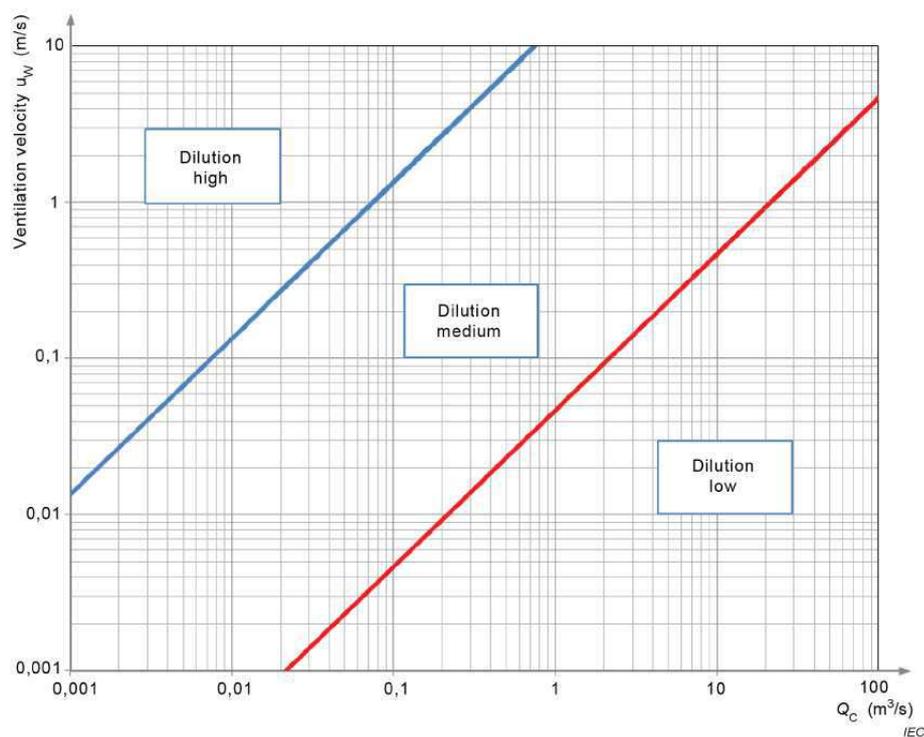
Para se determinar o grau de diluição a IEC 60079-10-1 (2020) fornece um gráfico para obtê-lo (Figura 2-3). Para tanto, faz-se necessário conhecer a liberação característica e a velocidade de ventilação, seja ela o vento natural num ambiente aberto ou um fluxo de ar induzido.

Como representado na Figura 2-3, o grau de diluição é dividido em três:

- Alta diluição: ocorre quando nas proximidades da fonte a concentração da substância inflamável é reduzida rapidamente, e após a interrupção da liberação, não há persistência de propagação.
- Média diluição: quando a concentração é controlada gerando uma zona estável ao passo que a liberação está em andamento e a atmosfera explosiva não persiste indevidamente após ser interrompida a liberação.
- Baixa diluição: quando há uma concentração significativa da substância inflamável ao passo que a liberação está ocorrendo, e a atmosfera de gás persiste após a interrupção da liberação.

De acordo com a norma, a linha azul que divide as áreas de alta e média diluição representa um volume inflamável de 0.1m^3 , enquanto que a linha vermelha entre as áreas de média e baixa diluição indica um volume inflamável de aproximadamente 100m^3 . A partir dos valores de volume indicados pelas linhas consegue-se apontar se o volume inflamável é maior ou menor que o valor do volume indicado pelas linhas, desta forma quanto mais à esquerda menor é o volume inflamável, e quanto mais a direita maior o volume inflamável.

Figura 2-3 - Gráfico para avaliar o grau de diluição com base na liberação característica e na velocidade do vento.



Fonte: IEC 60079-10-1 (2020)

2.2.4 Disponibilidade de ventilação

A disponibilidade de ventilação influencia diretamente na classificação de uma área, isto ocorre devido a ação do vento na dispersão da pluma e assim na diluição da mesma, auxiliando na redução do volume e extensão perigosa. Se uma atmosfera tem sua ventilação reduzida ou até removida, a dispersão do gás inflamável naquela atmosfera será reduzida, levando a uma classificação de área mais severa (IEC 60079-10-1, 2020).

São três os níveis de disponibilidade de ventilação:

- Boa: quando se trata de uma ventilação contínua ou permanente;
- Satisfatória: quando é esperada que haja ventilação durante a operação normal do processo, podendo esta ventilação ser descontinuada com baixa frequência ou por curtos períodos;

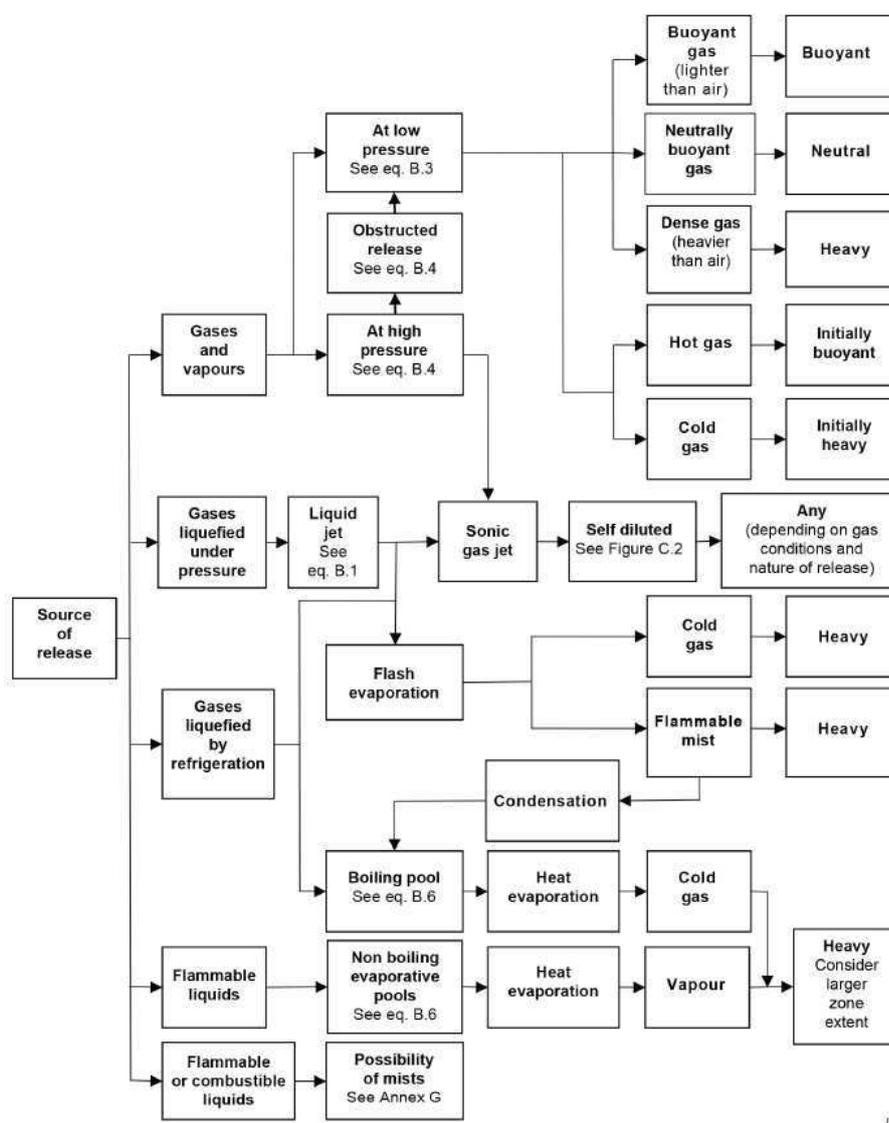
- Pobre: quando a ventilação não é boa ou satisfatória, não sendo esperada descontinuidades por longos períodos.

Geralmente em ambiente abertos a disponibilidade de ventilação é considerada boa e o grau de diluição médio, exceto na presença de valetas, canaletas, diques, etc. Já no interior de edificações que conta com ventilação natural, a disponibilidade de ventilação tenderá a ser satisfatória ou pobre, mas nunca boa devido as condições ambientes que são incertas (IEC 60079-10-1, 2020).

2.2.5 Formas de liberação

A norma traz consigo as formas de liberação, que, como sabido, dependem das condições de armazenamento do material, das propriedades físicas do material e, conseqüentemente, do estado de agregação do material. Os estados de agregação abordados pela IEC 60079-10-1 (2020) são: gás que se encontra armazenado em elevadas temperaturas ou pressão; gás armazenado na sua forma liquefeita, seja sob pressão ou por refrigeração; e líquido cuja liberação resulta na liberação de vapor inflamável. Um fluxograma (Figura 2-4) é apresentado ao longo do texto da norma para representar as possíveis formas de liberação e o padrão de comportamento que pode existir mediante as condições de liberação e de armazenamento levantadas.

Figura 2-4 – Formas de liberação sua natureza geral.



Fonte: IEC 60079-10-1 (2020)

2.3 CENÁRIOS E ETAPAS DE LIBERAÇÃO

Manna e Lees (2005), descreve que cada cenário de liberação possui um conjunto de cadeias de consequência que caracteriza um evento, e cada cadeia surge mediante a influência de diferentes fatores que interferem no evento, a exemplo da velocidade do vento e sua direção. Os autores elencam modelos que fornecem estimativas do efeito de um cenário de liberação, e a partir deles é possível extrair alguns dos principais fatores que definem um cenário de liberação, e são eles: a emissão, a expansão e o flashing (liberação bifásica), o

entrainment do ar, a dispersão e a pluma. Além desses fatores, conta-se também a vizinhança de contato imediato da liberação. De forma a complementar a análise de um cenário de liberação, Van den Bosch e Weterings (2005), e Cox, Lees e Ang (1990), sugerem que a análise de um cenário de liberação deve levar em consideração as condições iniciais do processo e o momento do fluido.

Cada fator mencionado será discutido a seguir.

2.3.1 Emissão

As características de uma emissão estão associadas ao orifício de liberação, às condições de processo (pressão e temperatura), e ao estado do fluido. Como consequência, diferentes tipos de liberação podem ocorrer, sendo elas na forma de um fluxo de gás ou de um fluxo de líquido ou fluxo bifásico. A emissão, constitui o termo fonte para os modelos de dispersão (MANNA e LEES, 2005).

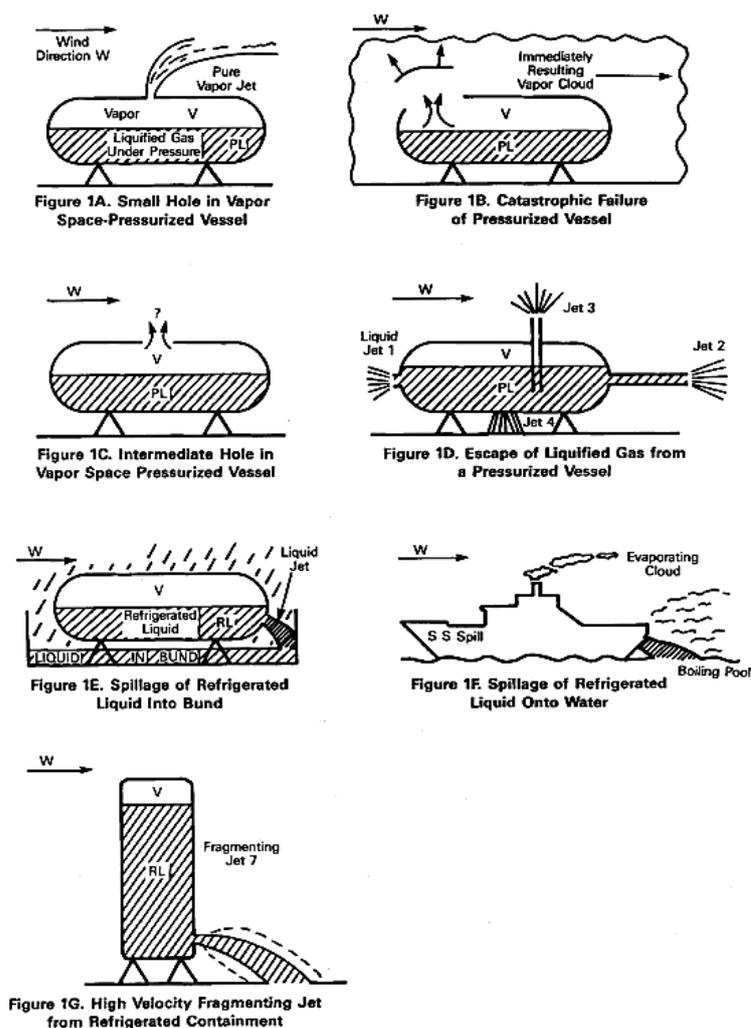
As condições do processo são determinantes num cenário de liberação no que diz respeito aos aspectos termodinâmicos e de estado da substância no armazenamento. Unido à essas condições, as características do orifício de liberação (formato e tamanho do orifício) implicam em diferentes valores da taxa de fluxo mássico da substância inflamável liberada para o ambiente, como também aponta para a intensidade do momento do jato de fluido. No caso de o momento do fluido ser baixo, tratando-se da liberação de gás ou vapor, será formado o que se chama de pluma, do contrário, se a liberação for de alto momento, o jato passa a ser dominado pelo momento, então se formará um jato de alto momento (COX, LEES E ANG, 1990; MANNA E LEES, 2005). O momento da liberação é um fator que afeta na dispersão da nuvem de gás, e será melhor entendido no tópico correspondente à dispersão.

Um outro fator importante de ser mencionado na emissão é a posição do orifício no equipamento, pois este indicará o estado do fluxo do fluido nos casos em que for observado um armazenamento de gás liquefeito por exemplo. Para melhor compreender o fator posição do orifício, Kaiser (1989) realizou uma revisão das formas que a amônia pode ser liberada para a atmosfera mediante

seu armazenamento. Segundo o autor, a forma como ocorre essa liberação influencia na dispersão atmosférica do jato liberado. E pode-se afirmar que repercute na classificação de uma área de risco.

A Figura 2-5 é parte do estudo desenvolvido por Kaiser (1989), e descreve os possíveis tipos de liberação que pode haver conforme as condições de armazenamento, ou condições do processo, e a posição do orifício.

Figura 2-5 – Alguns dos mecanismos de liberação concebíveis.



Fonte: Kaiser (1989).

Analisando os casos ilustrados na Figura 2-5 que se enquadram no escopo dos cenários de classificação de área (1A, 1C e 1D), iniciando pela figura intitulada 1A. Trata-se de uma fonte de emissão situada em um tanque cuja substância é armazenada em sua forma liquefeita sob pressão, na condição de

equilíbrio líquido/vapor. O orifício é descrito como pequeno e posicionado na região de vapor. Neste cenário, a emissão será caracterizada por um fluxo de gás emergindo, possivelmente, com uma velocidade sônica, caracterizando assim um jato de alto momento.

Em uma segunda situação na Figura 2-5 1C trata do mesmo caso da 1A, porém com um tamanho intermediário de abertura da fonte de emissão. Devido ao tamanho do orifício ser maior que no caso anterior, segundo descreve Kaiser (1989), a mistura amônia-ar muda de flutuante, visto no caso anterior (1A), para mais densa que o ar (1C). Mais além, o autor descreve que quatro possíveis regimes de fluxo podem ocorrer no orifício observado na ilustração 1C, e eles são: o fluxo de vapor já mencionado no caso anterior; o fluxo de regime *bubbly*, ou borbulhante, descrito por um fluxo de líquido contendo bolhas; o fluxo de regime turbulento *churn*, onde a fase líquida possui regiões de vapor coalescida e de tamanho crescente; e o regime de fluxo de gotas, caracterizado pela liberação de vapor contendo gotículas de líquido. Tais fluxos resultam em uma massa mais densa da mistura amônia-ar devido à presença da fase líquida, ao fluxo de vapor presente e às características da substância.

Agora, observando a Figura 2-5 1D, várias possibilidades de liberação são apresentadas dadas as mesmas características de armazenamento que nos casos anteriores. A liberação será definida pela posição do orifício com relação à região líquida. O jato 1 (*Jet 1*) é resultado de uma ruptura na parede do tanque na região que contém amônia líquida, acarretando em um fluxo líquido. Ao ser liberada a amônia, ocorre imediatamente o *flash* devido a despressurização, podendo haver o fenômeno *rainout* (chuva).

Os jatos 2 e 3 (*Jets 2 e 3*), que representam inicialmente um fluxo de líquido através de um tubo, apontam para três diferentes tipos de fluxo no plano de liberação que podem ocorrer, são eles: I. uma liberação de fluxo líquido devido ao tubo ser curto o suficiente que resulta em um fluxo líquido, ou uma ruptura na parede do tanque conforme descrito no caso anterior; II. uma liberação cujo fluxo na saída é bifásico, achando-se em equilíbrio termodinâmico; e III. uma liberação caracterizada por um fluxo bifásico porém as fases líquido-vapor não se acham em equilíbrio termodinâmico. A vazão mássica liberada no caso de um fluxo líquido é maior que em um fluxo bifásico, e este por sua vez é maior que em um

fluxo de gás. Por fim, o jato 4 (*Jet 4*) expressa uma liberação de líquido que choca com o solo formando uma poça.

O presente trabalho tem como foco a emissão do tipo bifásica, e para melhor compreendê-la será descrita a seguir.

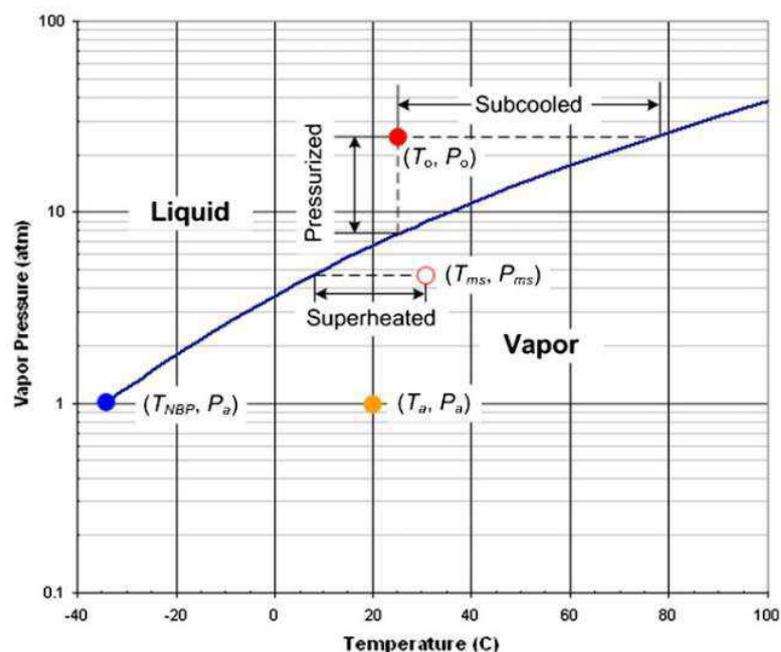
2.3.1.1 Liberação Bifásica

Dentre as formas de armazenamento que podem resultar em uma liberação bifásica encontram-se o armazenamento da substância na condição saturada, (líquido saturado, vapor saturado, ou líquido/vapor saturado), e o armazenamento na condição de líquido subresfriado porém superaquecido nas condições atmosféricas.

Os termos subresfriado e superaquecido indicam a situação na qual a temperatura do fluido se encontra com relação às condições de saturação na pressão de comparação. Ou seja, o fluido será considerado subresfriado se sua temperatura se achar menor que a temperatura de saturação na pressão de onde o fluido se encontra, e será superaquecido se a temperatura do fluido for maior que a temperatura de saturação na pressão do local onde este fluido se encontra (BRITTER et al., 2011; ICHARD, 2012; ANJOS, 2021).

Na Figura 2-6 contém um gráfico de pressão de vapor versus temperatura a partir do qual é possível visualizar o comportamento da temperatura do fluido, neste caso o cloro, quando este é subresfriado ou superaquecido. A curva azul corresponde a curva de saturação do cloro, ou seja, onde o cloro coexiste nas duas fases líquido/vapor. O ponto vermelho, que corresponde ao cloro líquido subresfriado, mostra que mesmo com o aumento da pressão até aproximadamente 15 bar, o cloro líquido manteve-se na temperatura de 25°C. Quando comparado a distância da curva de saturação, há um delta de temperatura, ou seja, o grau de subresfriamento. Da mesma forma para o círculo em vermelho, que aponta o gás superaquecido, porém desta vez o contrário, para uma pressão de aproximadamente 5 bar, a temperatura manteve-se elevada quando comparada com a condição de saturação dada a mesma pressão. E então observa-se o delta de temperatura, grau de superaquecimento.

Figura 2-6 - Curva de saturação do cloro.



Fonte: Britter et al. (2011)

Caracterizar um fluido como subresfriado ou superaquecido, definirá o estado do fluido no fluxo à medida que este sai do reservatório. Se o fluido for superaquecido com relação às condições no orifício de liberação, haverá mudança de fase no orifício com a depressurização durante a liberação. Mas, se o fluido for subresfriado nas condições do orifício, não haverá mudança de fase na depressurização. Conforme descreve Ichard (2012), na maioria das liberações *flashing* o líquido é subresfriado ou saturado, com relação às condições de armazenamento ($T_{fluid} \leq T_{sat}(P_{storage})$), e superaquecido com relação às condições ambiente ($T_{fluid} > T_{sat}(P_{amb})$).

Tratando-se do armazenamento nas condições de saturação, o jato de liberação pode ser caracterizado por um fluxo denominado *choked* (fluxo crítico, sônico) ou pelo fluxo *unchoked* (fluxo subsônico). Um fluxo é considerado *choked* quando não mais depende da variação de pressão mediante as condições a jusante do orifício de saída, dependendo apenas da pressão a montante

(pressão de armazenamento), e sua velocidade é a máxima possível (velocidade do som no gás) (MANNAN e LEES, 2005).

Assim como tratado e ilustrado na Figura 2-5, a posição do orifício de liberação implica em diferentes emissões. Analisando a situação cujo armazenamento é de líquido saturado, dada a posição do orifício na região líquida. Nesta situação é levado em consideração a espessura da parede do reservatório, ou do tubo por onde percorrerá o fluido. Esta característica definirá se a liberação ocorrerá como um fluxo em equilíbrio termodinâmico ou como um fluxo na condição não-equilíbrio.

Observando a saída do orifício de liberação, um fluxo na condição de não-equilíbrio se dá quando a espessura da parede (ou o comprimento do tubo) é fino o suficiente ao ponto de a liberação ocorrer tão rapidamente que não oferece tempo de o fluido mudar de fase e manter o equilíbrio termodinâmico. Sucede-se, então, um regime de não-equilíbrio. Já quando a espessura é grande o suficiente de forma a alcançar o equilíbrio termodinâmico devido ao tempo de residência do fluido, então o regime do fluxo é de equilíbrio termodinâmico.

Alguns trabalhos na literatura apontam para 0.1m como sendo o valor da espessura ou comprimento que delimita o tipo de fluxo que irá ocorrer, este valor é o mais adotado. Logo, se a espessura é maior que 0.1m então o fluxo é considerado em equilíbrio, do contrário se dará na condição de não-equilíbrio. Conforme descrito por Mannan e Lees (2005), Fletcher e Johnson (1984) em seus estudos, expressam que todo o fluxo líquido está presente para uma razão de $l/d < 2$ e que para pressões elevadas é possível observar o *flashing* para um $l/d < 1$, sendo l o comprimento do tubo ou espessura da parede de um equipamento, e d o diâmetro do orifício de liberação (FAUSKE, 1985; MANNA e LEES, 2005; VAN DEN BOSCH e WETERINGS, 2005; BRITTER et al., 2011).

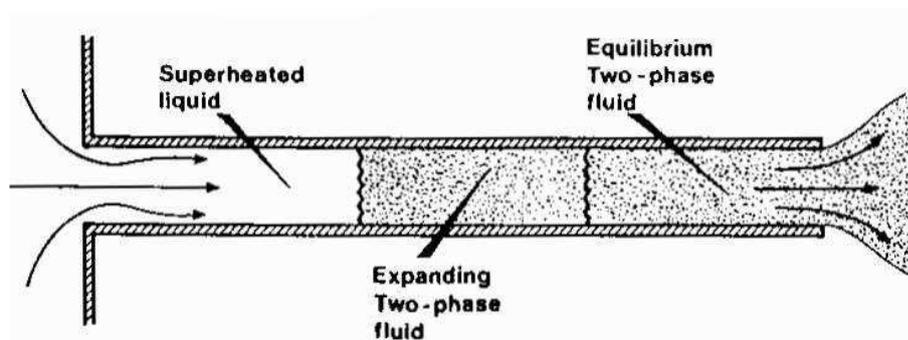
Em última análise, abordando uma liberação de um armazenamento de líquido subresfriado. Este cenário corresponde ao que possui maior fluxo mássico dentre todos mencionado, e é caracterizado pela formação de poças. Durante a liberação pode haver mudança de fase caso o grau de subresfriamento seja alto, acarretando em um fluxo mássico reduzido devido a presença de vapor (BRITTER et al., 2011). No que tange às poças formadas,

elas constituem fontes de alimentação de vapor das nuvens de gás inflamável, dificultando a diluição da nuvem de gás e conseqüentemente agravando a classificação da área.

De acordo com Mannan e Lees (2005) quando se lida com a liberação de um líquido superaquecido, onde o fluxo mássico é elevado e a fração de vapor também devido ao *flashing*, corresponde ao caso mais perigoso. Neste cenário, uma grande quantidade de líquido ainda se faz presente após a expansão, esse líquido evapora se unindo a fração de vapor já presente devido à despressurização e conseqüente *flashing*. O fluxo no plano de saída do orifício se acha totalmente líquido, superaquecido, em condição metaestável, em não-equilíbrio, caracterizado por um jato líquido. Ao passo que ocorre a despressurização, ocorre o *flashing*, formando um jato bifásico que em seguida alcança o equilíbrio termodinâmico assim como todas as despressurizações já mencionadas.

Para melhor visualizar na Figura 2-7 encontra-se a trajetória do fluxo de um líquido superaquecido logo na entrada do orifício, ao longo do que representa a espessura da parede do reservatório ou um comprimento de tubo. Ao passo que o fluido atravessa todo o comprimento até o plano de saída do orifício ocorre a expansão do fluido, agora bifásico. O fluxo caminha, então, para uma condição de equilíbrio, resultando em uma liberação bifásica em equilíbrio termodinâmico.

Figura 2-7 - Regime de fluxo bifásico assumido para um modelo de descarga.



Fonte: Van den Bosch e Weterings (2005), p.108.

2.3.2 Expansão e flashing

A expansão constitui uma das etapas da liberação bifásica e é conhecida como a etapa de transição do fluxo interno para um ambiente mais próximo, onde o fluxo parte de uma região de maior pressão (pressão no orifício de liberação) para outra de menor pressão (pressão ambiente). A depressurização leva a uma brusca quebra da fase líquida havendo a formação das gotículas líquidas, as quais são maiores inicialmente, caracterizando a região de expansão. No caso da liberação de um jato de líquido subresfriado depressurizado, as gotículas formadas estão associadas a um processo de quebra mecânico. Já em uma liberação bifásica de jato de líquido superaquecido, deve-se atentar que a formação das gotículas não decorre somente de um processo mecânico, mas também de um processo termodinâmico (LACOME et al., 2020; WITLOX e BOWEN, 2002).

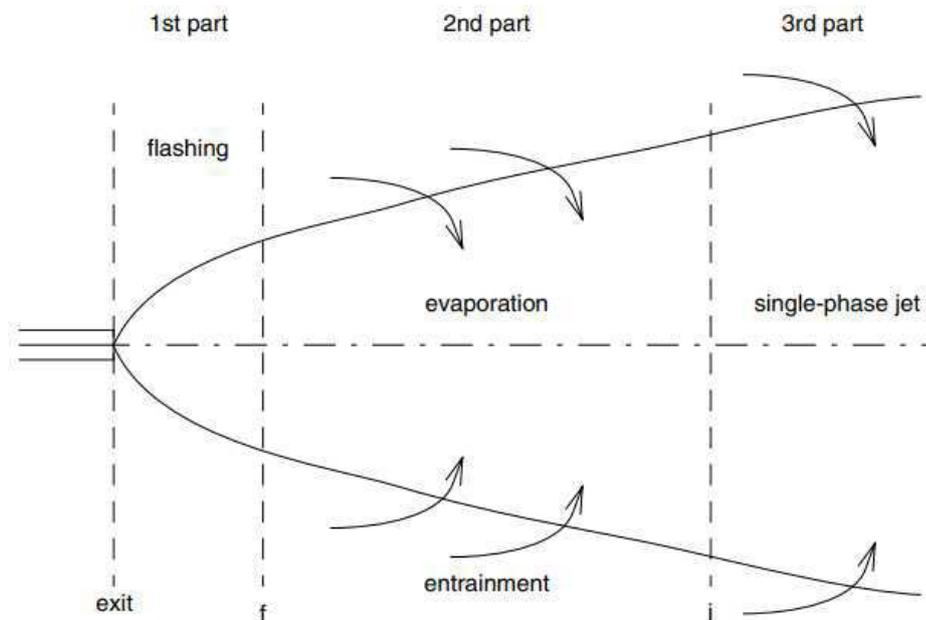
Conforme descrito no guia do CCPS (DYKE et al., 1997), as gotas formadas pela quebra mecânica são governadas pelas forças de cisalhamento. Já se tratando de uma liberação de jato de líquido superaquecido, além da quebra mecânica, o processo de quebra termodinâmico se dá pelas forças resultantes da grande expansão volumétrica do líquido em ebulição, mais especificamente atomização *flashing*.

O *flashing* é a quebra brusca de uma substância liquefeita pressurizada, mais especificamente de líquido em condição superaquecida, que ocorre como resultado de uma repentina redução da pressão. O *flashing* pode se iniciar antes ou depois do plano de saída do orifício, e segue até o fim da região de expansão. O final da região de expansão se dá quando a pressão do fluxo alcança a pressão atmosférica. Em resumo, o *flashing* é resultado da instabilidade hidrodinâmica, ou seja, a instabilidade no escoamento da substância devido a depressurização; e da instabilidade termodinâmica devido a condição de não-equilíbrio associada ao estado metaestável do fluido (LACOME et al., 2020; CALAY e HOLDO, 2008; VAN DEN BOSCH e WETERINGS, 2005; WITLOX e BOWEN, 2002).

Após as instabilidades do jato, este segue para alcançar a condição de equilíbrio, que ocorre na região de *entrainment* descrita no próximo tópico. Para

facilitar a compreensão da liberação de um jato bifásico, segue na Figura 2-8 um esquema das etapas que constituem tal liberação.

Figura 2-8 - Esquema das etapas de uma liberação de jato bifásico.



Fonte: Van den Bosch e Weterings (2005), p.60.

2.3.3 Entrainment

O *entrainment*, como o próprio nome sugere, corresponde ao arrastamento ou arrasto do ar ambiente para o interior do jato à medida que este se propaga, e ocorre devido a característica turbulenta do jato e da presença de ventilação no ambiente. Nesta etapa o jato segue para alcançar a condição de equilíbrio, sendo necessário que o superaquecimento do líquido seja liberado, o que ocorre através da evaporação das gotas à medida que se dispersam no ambiente.

A mistura formada por ar arrastado para dentro da nuvem, vapor e gotículas líquidas do componente liberado, precisa manter a conservação da entalpia, e para isso a fase líquida remove calor latente da mistura vapor do componente /ar ambiente, havendo a evaporação do líquido. Neste instante de remoção de calor latente por parte do líquido, ocorre a temperatura mínima abaixo do ponto de bolha na pressão do ambiente que se encontra. A evaporação total das

gotículas dispersas na nuvem de gás normalmente caracteriza o final da zona de *entrainment* (KUKKONEN et al., 1994, apud ICHARD, 2012; CALAY e HOLDO, 2008).

O ar que entra no jato além de fornecer energia na forma de calor latente para a fase líquida, auxilia na diluição da nuvem de vapor da substância inflamável, ou seja, reduz a fração volumétrica. Tal redução acarreta também em redução da pressão de vapor no interior do jato e, conseqüentemente, da temperatura da mistura. Ao passo que o jato é propagado, o ar ambiente reduz a velocidade do jato e eleva a temperatura da mistura para a temperatura ambiente. Segundo Raj e Morris (1987) o *entrainment* e o arrasto interfacial levam a redução da velocidade da pluma podendo ser bem próxima a velocidade do vento. Assim, a perda de momento que sucede ao jato acarreta em um menor alcance da nuvem de gás inflamável e, conseqüentemente, da extensão perigosa da área classificada (KUKKONEN et al., 1994, apud ICHARD, 2012; CALAY e HOLDO, 2008; WITLOX e BOWEN, 2002).

Outra característica do *entrainment* é a quebra secundária e a evaporação, possuindo gotículas dispersas com um diâmetro menor do que na etapa anterior (expansão) devido a evaporação das gotículas. A ação do momento no plano de saída do orifício e da flutuabilidade (efeito *buoyant*) conferem diferentes trajetórias às gotículas, podendo permanecer em suspensão na nuvem e evaporar, e/ou cair ocorrendo a chuva (*rainout*) e possível formação de uma poça líquida evaporativa (LACOME et al., 2014; POLANCO, HOLDO e MUNDAY, 2010, p.15; WITLOX e BOWEN, 2002).

2.3.4 Dispersão

A dispersão é caracterizada por misturar e espalhar os gases no ar contribuindo para o crescimento da nuvem de gás. São vários os fatores que afetam a dispersão e implicam, conseqüentemente, na extensão alcançada pela nuvem (CCPS, 1997; VAN DEN BOSCH e WETERINGS, 2005; MANNA e LEES, 2005; CROWL e LOUVAR, 2011). Conforme descreve o guia do Centro de Segurança de Processos Químicos (*Center of Chemical Process Safety – CCPS*,

1997), a dispersão é afetada pela densidade da liberação inicial, pela presença de líquido na nuvem, pela taxa da substância liberada, duração e modo de liberação, além das condições atmosféricas predominantes, da elevação da fonte de liberação (diga-se a altura da fonte com relação ao solo), da influência dos terrenos presentes no domínio (a presença de obstáculos, a rugosidade do solo, inclinação ou elevação de terrenos), da geometria da fonte e da direção da liberação. Crowl e Louvar (2011) e Manna e Lees (2005) reforçam em seus trabalhos parte desses fatores, sendo alguns deles discutidos a seguir.

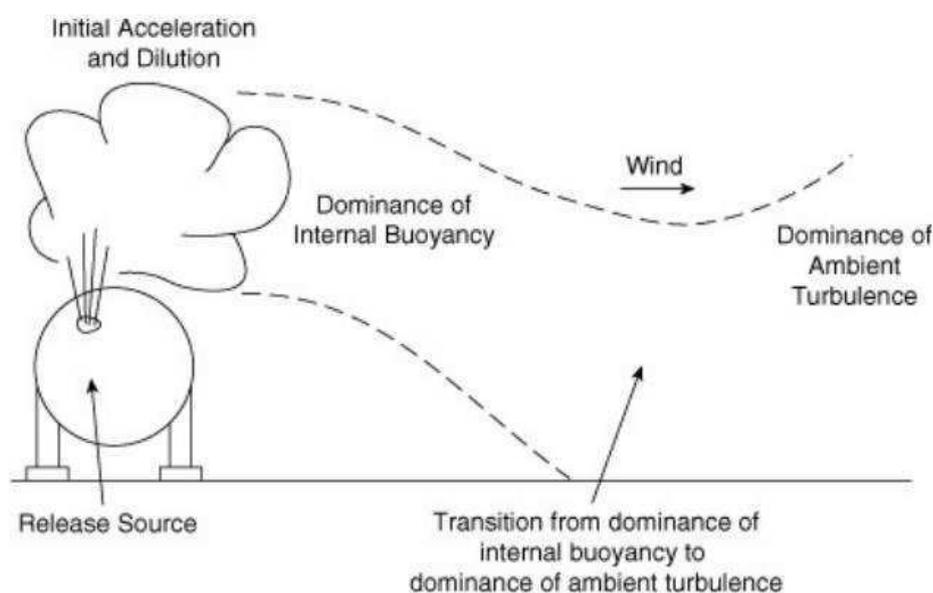
A densidade da pluma é um dos fatores de considerável influência no processo de dispersão. Quando observada a diferença de densidade com relação à densidade da vizinhança, normalmente a densidade do ar ambiente, três divisões surgem baseado no comportamento da nuvem no ambiente em virtude das características da substância liberada, são elas: a flutuação positiva, em que a densidade da nuvem é menor que a densidade do ar; a flutuação neutra, conhecida pela densidade da nuvem ser igual ou aproximadamente igual a densidade do ar ambiente; e por fim, a flutuação negativa, onde a densidade da nuvem é maior que a densidade do ar ambiente. A denominação dos termos indica como a pluma tende a se comportar no ambiente, ou seja, se a flutuação é positiva, a tendência é que a nuvem possua um comportamento ascendente, quando negativa a nuvem tende a descer, e quando neutra ela se dispersa no sentido da liberação, não ascendendo ou descendo, mas horizontalmente.

Dada a importância da densidade da nuvem, esta encontra-se intrinsecamente relacionada à temperatura de liberação e do ambiente atmosférico para onde o material é liberado, como também à presença de gotículas líquidas na nuvem de gás. A presença de gotículas líquidas na nuvem de gás alimenta o vapor da nuvem, e favorece o aumento da densidade efetiva de vapor, o que normalmente ocorre nos casos de liberação de gás liquefeito pressurizado.

Neste sentido, observando uma liberação de uma substância mais pesada que o ar, conforme relata o guia CCPS (1997) ao descrever o trabalho de Melhem e Croce (1994), foi possível identificar um padrão no comportamento da pluma durante a dispersão. Foi observado que para maiores diferenças entre a densidade da nuvem e do ar ocorre uma propagação significativa da nuvem. Isto

pode ser compreendido pela presença de mistura do ar atmosférico na superfície da pluma, que auxilia na propagação horizontal, enquanto que, no caso de haver o contato da nuvem com o solo, a diluição é reduzida, e reduzida também a propagação vertical. Neste caso a nuvem é quem domina o processo de dispersão. Porém, ao passo que a diluição ocorre, a diminuição da densidade também ocorre, e então a atmosfera passa a dominar o processo de dispersão da nuvem (Figura 2-9), ou pode-se dizer que é dominado pelo vento atmosférico.

Figura 2-9 – Liberação da substância, efeito da flutuabilidade positiva ou negativa da pluma, e as dominâncias no processo de dispersão.



Fonte: Hanna e Drivas (1987), apud Crowl e Louvar (2011).

As condições atmosféricas também afetam a dispersão, e isto inclui a velocidade do vento. Na literatura é apontado que as velocidades de vento mais brandas possuem um efeito mais significativo na dispersão da pluma, principalmente de nuvens de gás pesado, do que as velocidades de vento elevadas (ALMEIDA, BARROS, ALVES, 2021; BARROS et al., 2020; CUCULEANU et al., 2018; CCPS, 1997). Isso pode ser compreendido pelo fato de haver uma predominância de energia potencial da nuvem de gás pesado sob a energia cinética turbulenta de ventos brandos, do que no caso de altas velocidade de vento que possuem uma elevada energia cinética turbulenta que

predomina sob a energia potencial da nuvem, favorecendo assim a diluição da nuvem.

Os aspectos mencionados no parágrafo anterior também estão relacionados ao momento da liberação, que afeta o processo de dispersão e indica o modo de liberação. De acordo com Manna e Lees (2005), uma liberação considerada de baixo momento forma uma pluma, enquanto que a liberação de alto momento um jato turbulento. A elevada energia cinética no jato turbulento favorece uma elevada entrada de ar na nuvem, modificando a densidade da nuvem de gás e trazendo para a nuvem um formato bem definido. Enquanto que a pluma, por apresentar um baixo momento, possuirá um formato não bem definido, porém ondulado.

Os modos de liberação definidos pelo CCPS (1997) estão relacionados ao momento da liberação, e são eles: a liberação instantânea de curta duração, expressa na forma de uma liberação puff, ou seja, quando a nuvem se espalha em todas as direções devido ao caráter instantâneo da liberação; a liberação contínua, que se expressa na forma de pluma devido ao caráter contínuo da liberação; a liberação contínua dominada pelo momento, expressa por um jato; a liberação de baixo momento de taxa variável, representado por uma pluma; e a liberação de momento de taxa variável, representado pelo jato. Cada uma destas liberações indica diferentes graus de diluição, e conseqüentemente de flutuação, e aponta para instantes de dominância diferentes da flutuação da nuvem e das condições atmosféricas no processo de dispersão, e, principalmente, o quanto a nuvem foi capaz de se espalhar pelo ambiente.

CAPÍTULO 3 MODELO MATEMÁTICO

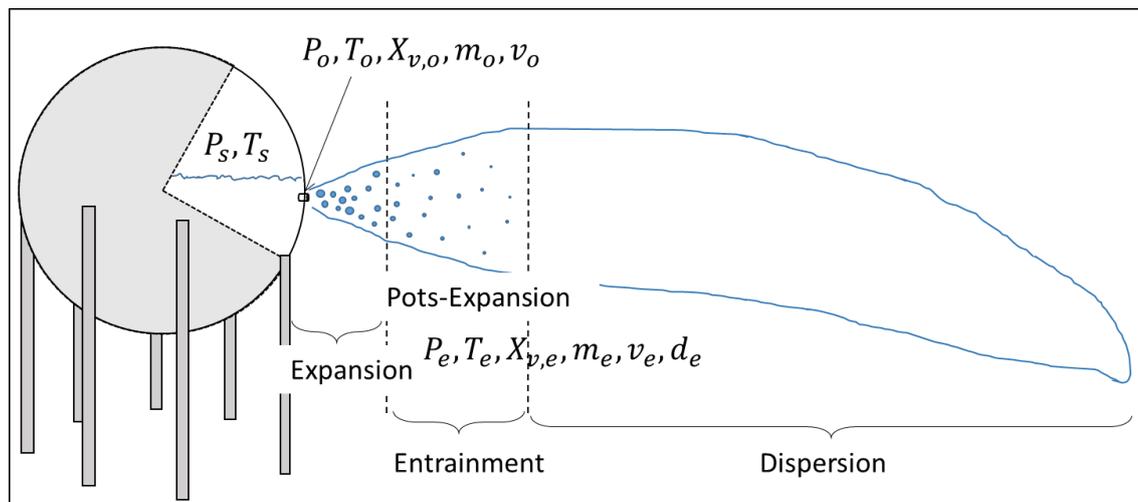
<u>CAPÍTULO 3</u>	<u>MODELO MATEMÁTICO</u>	<u>49</u>
3.1	JATO DE LIBERAÇÃO	49
3.2	MODELO CFD	54
3.2.1	ABORDAGEM EULERIANA-LAGRANGEANA	54
3.2.2	MODELO DE ARRASTE E DE EMPUXO	57
3.2.3	MODELO DE TURBULÊNCIA	57
3.2.4	MODELOS DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR E QUEBRA DE GOTA	61
3.2.5	MODELO DE EVAPORAÇÃO DE LÍQUIDO	64

Mediante os tópicos explanados, é possível observar a cadeia de fatores que englobam um cenário de liberação, mais especificamente de uma liberação bifásica de um gás liquefeito pesado. A seguir, serão apresentados os cálculos aplicados na determinação dos parâmetros de entrada necessários à uma simulação bifásica em CFD.

3.1 JATO DE LIBERAÇÃO

A fim de obter os dados que caracterizam uma liberação bifásica, faz-se necessário conhecer as informações no armazenamento bem como no orifício de liberação, e assim será possível obter os parâmetros na região de pós-expansão, levando em consideração um tratamento subsônico do jato bifásico. Na Figura 3-1 encontram-se ilustrados as etapas de liberação e os parâmetros associados a cada uma delas, que serão melhor compreendidos a seguir.

Figura 3-1 - Etapas de uma liberação bifásica e parâmetros associados a cada etapa para a definição do cenário de liberação.



Fonte: Do autor.

Na etapa de armazenamento, o parâmetro avaliado no caso de um armazenamento de gás liquefeito em condição de saturação será ou a temperatura (T_s) ou a pressão (P_s) de armazenamento, conhecendo-se um dos dois, o outro pode ser definido pela equação de Antoine:

$$\log_{10} P_s = A - \frac{B}{T_s + C} \quad (3.1)$$

Observando as condições de equilíbrio e de não equilíbrio que pode existir no orifício de liberação, segue-se a determinação dos parâmetros para cada uma dessas condições no orifício.

No primeiro caso, em que o fluxo bifásico encontra-se em equilíbrio termodinâmico no orifício, a pressão no interior do reservatório será maior que a pressão no orifício (P_o), e esta pode ser representada por (MANNA e LEES, 2005):

$$P_o = 0.85P_s \quad (3.2)$$

Baseado na estimativa da pressão no orifício de liberação, é possível obter a temperatura (T_o) no mesmo.

$$T_o = \frac{B}{A - \log_{10} P_o} - C \quad (3.3)$$

Em seguida, dado que se trata de uma expansão adiabática, a obtenção da fração mássica de vapor no orifício (Eq. (3.4)) se dará como uma função da entalpia de vapor (ΔH^{vap}), da capacidade calorífica do líquido (Cp_l) e da diferença entre a temperatura do armazenamento e do orifício.

$$X_{v,o} = \frac{Cp_l(T_s - T_o)}{\Delta H^{vap}} \quad (3.4)$$

Obtida a fração de vapor no orifício de liberação, a densidade da mistura líquido/vapor poderá ser então calculada.

$$\rho_{m,o} = \frac{1}{\frac{X_{v,o}}{\rho_{g,o}} + \frac{1 - X_{v,o}}{\rho_{l,o}}} \quad (3.5)$$

Onde, $\rho_{g,o}$ e $\rho_{l,o}$ correspondem às densidades do gás e do líquido nas condições do orifício (P_o e T_o), sendo calculadas com base na equação dos gases ideais e em correlações presentes na literatura, respectivamente.

Para o cálculo da taxa de fluxo mássico (m_o) no orifício, foi considerado o pior cenário de liberação bifásico, logo foi utilizada a equação de Bernoulli. E para a velocidade no orifício (v_o), partiu-se da equação de conservação de massa.

$$m_o = C_d A_o \sqrt{2\rho_{m,o}(P_s - P_o)} \quad (3.6)$$

$$v_o = \frac{m_o}{\rho_{m,o} A_o} \quad (3.7)$$

Agora, olhando para o segundo cenário, em que o fluxo de liberação encontra-se como um líquido superaquecido no orifício de liberação, então pode-se dizer que a fração de vapor é zero no orifício ($X_{v,o} = 0$). Neste cenário o regime é de não equilíbrio. Sendo a pressão no orifício igual a pressão ambiente ($P_o = P_{amb}$), a temperatura do fluido no orifício neste caso equivale a temperatura de armazenamento ($T_o = T_s$), e não à temperatura do fluido na pressão que se encontra o orifício, ou seja, na pressão ambiente. Em vista disso, a taxa do fluxo mássico (Eq. (3.8)) e, conseqüentemente, a velocidade no orifício (Eq.(3.9))

passam a ser tratadas como função da diferença entre a pressão de armazenamento e a pressão ambiente.

$$m_o = C_d A_o \sqrt{2\rho_{l,o}(P_s - P_{amb})} \quad (3.8)$$

$$v_o = \frac{m_o}{\rho_{l,o} A_o} \quad (3.9)$$

A condição de pseudofonte utilizada para obter informações no pós-expansão, a parti das quais serão realizadas as simulações em CFD, conta com o conhecimento das condições no orifício e do ambiente. Logo, a pressão no pós-expansão é a pressão ambiente, e a temperatura do jato equivale a temperatura de saturação da substância na condição ambiente ($T_{sat,amb}$). A velocidade (v_e) e a fração de vapor ($X_{v,e}$) no pós-expansão podem ser obtidas pela solução das equações de conservação de massa, momento e energia, e são expressas, respectivamente, por:

$$T_e = T_{sat,amb} = \frac{B}{A - \log_{10} P_{amb}} - C \quad (3.10)$$

$$v_e = v_o + \frac{(P_o - P_{amb})}{v_o \rho_{l,o}} \quad (3.11)$$

$$X_{v,e} = \left(C_p(T_o - T_b) + X_{v,o} \Delta H^{vap,e} + \frac{v_o^2 - v_e^2}{2} \right) \frac{1}{\Delta H^{vap,e}} \quad (3.12)$$

Segue-se, então, a determinação da área formada pelo jato no pós-expansão (A_e), e por fim obter o diâmetro expandido (d_e). Logo depois, é possível calcular a taxa de fluxo nessa posição com base na equação de conservação.

$$A_e = \frac{\rho_{l,o} A_o v_o}{\rho_{m,e} v_e} \quad (3.13)$$

$$d_e = \sqrt{\frac{4A_e}{\pi}} \quad (3.14)$$

$$m_e = \rho_{m,e} v_e A_e \quad (3.15)$$

O termo densidade da mistura nas condições do pós-expansão, pode ser calculado como visto anteriormente:

$$\rho_{m,e} = \frac{1}{\frac{X_{v,e}}{\rho_{g,e}} + \frac{1 - X_{v,e}}{\rho_{l,e}}} \quad (3.16)$$

A temperatura na pseudofonte corresponde a temperatura de saturação da substância nas condições do pós-expansão, podendo ser calculada pela equação de Antoine.

A determinação do tamanho da gota líquida no pós-expansão foi calculada com base na correlação desenvolvida na Fase III do projeto JIP (*Joint-Industry Project*) resultante de experimentos realizados pela Universidade de Cardiff e pelo INERIS (WITLOX et al., 2009; WITLOX, HARPER and OKE, 2009; KAY, BOWEN and WITLOX, 2010). Para tanto, faz-se necessário conhecer o grau de superaquecimento, ou seja, a diferença entre a temperatura no orifício e a temperatura de saturação na pressão do orifício, para a determinação do Diâmetro Médio de Sauter (SMD) da partícula. O grau de superaquecimento ditará em qual dos três regimes se enquadrará o cálculo do tamanho da gota, podendo ser o regime de quebra mecânica, de transição, ou flashing total. Se o regime for de quebra mecânica a Equação (3.17) ($SMD = d_p^m$) é utilizada, se regime de transição a Equação (3.18) ($SMD = d_p^t$), mas se for o regime flashing total, então, Equação (3.19) ($SMD = d_p^f$). Para uma melhor compreensão do modelo consultar artigos relacionados (WITLOX, HARPER and OKE, 2009; WITLOX et al., 2009; KAY, BOWEN and WITLOX, 2010).

$$\frac{d_p^m}{d_o} = 74 We_{Lo}^{-0.854} Re_{Lo}^{0.441} \left(\frac{L}{d_o}\right)^{0.114} \left(\frac{\mu_{Lo}}{\mu_{water,stp}}\right)^{0.971} \left(\frac{\sigma_{Lo}}{\sigma_{water,stp}}\right)^{-0.368} \left(\frac{\rho_{Lo}}{\rho_{water,stp}}\right)^{-0.107} \quad (3.17)$$

$$d_p^t = d_p^m - \frac{\Delta T_{sh} - \Delta T_{sh}^A}{\Delta T_{sh}^B - \Delta T_{sh}^A} (d_p^m - 80 \times 10^{-6}) \quad (3.18)$$

$$d_p^f = \max\{10 \times 10^{-6}, 80 \times 10^{-6} - 10^{-7}(\Delta T_{sh} - \Delta T_{sh}^B)\} \quad (3.19)$$

Onde d_o é o diâmetro do orifício, We o número de Weber, Re o número de Reynolds, L a espessura da parede do vaso, σ a tensão superficial, μ a viscosidade dinâmica, e ρ a densidade. Os subscritos lo e $water, stp$ indicam,

respectivamente, às propriedades da substância liberada na fase líquida nas condições do orifício, e da água nas condições padrão de temperatura e pressão (1 atm e 0°C neste caso).

3.2 MODELO CFD

A seguir serão descritos os modelos utilizados em CFD para simular os cenários de liberação bifásica do presente trabalho.

3.2.1 Abordagem Euleriana-Lagrangeana

Dentre as abordagens disponíveis em CFD para simular uma liberação multifásica, destaca-se a abordagem Euleriana-Lagrangeana devido a sua característica de discretização da fase particulada e rastreamento da mesma, permitindo uma abordagem mais realística da liberação e contribuindo para um acompanhamento mais próximo do comportamento da partícula.

No contexto de uma liberação bifásica, a fase contínua é considerada a mistura ar atmosférico e fase vapor da substância liberada, sendo tratada pela abordagem Euleriana. Enquanto a fase particulada, que é tratada pela abordagem Lagrangeana, é representada pelas gotículas líquidas da substância liberada e são simuladas como partículas individuais discretamente distribuídas na fase contínua. As equações governantes que modelam as simulações em CFD são definidas pelas equações de conservação de massa, espécie, momento e energia, Equações (3.20) a (3.23) respectivamente.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} Y_i) = \nabla \cdot (\Gamma_{iM} \nabla Y_i) + S_{MSi} \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + S_M \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial (\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} h) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{U} + S_E \quad (3.23)$$

Onde, ρ corresponde a densidade da mistura, Γ_{iM} o coeficiente de difusão do componente, Y_i a fração mássica do componente (Eq.(3.24)), e τ o tensor tensão que está relacionado a taxa de deformação (Eq. (3.25)). Os termos S_{MSi} , S_M e S_E representam os termos fonte associados às respectivas equações de conservação da espécie, momento e energia. Tais termos existem para descrever a geração ou o sumidouro de espécie, momento ou energia, a exemplo do primeiro caso que pode compreender a presença de reação química, e na ausência de reação o termo é nulo, e no caso do momento o termo fonte pode modelar a presença do empuxo e da força de arrasto na equação de conservação do momento.

$$Y_i = \frac{\rho_i}{\rho} \quad (3.24)$$

$$\tau = \mu \left(\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T - \frac{2}{3} \delta \nabla \cdot \mathbf{U} \right) \quad (3.25)$$

Mediante a importância do empuxo numa análise de liberação bifásica, este entra como um termo fonte na equação do momento e é expresso por:

$$S_{M,buoy} = (\rho - \rho_{ref}) \mathbf{g} \quad (3.26)$$

Onde o termo de diferença de densidade é calculado considerando ou o modelo de empuxo completo, ou pelo modelo de Boussinesq.

Observando a equação da conservação da energia (Eq. (3.23)), o λ expressa a condutividade térmica do fluido, e o termo h é tratado como energia interna contemplando o uso da equação da energia térmica (*Thermal Energy*), que considera o termo h_{tot} da equação da energia total como sendo a energia interna (e) representada por:

$$e = h - \frac{P}{\rho} \quad (3.27)$$

Quanto a fase particulada, conforme descreve o Theory Guide CFX R2 (2020), na abordagem Lagrangeana ocorre o rastreamento de partículas que é realizado a partir da integração do caminho das partículas ao longo do domínio discretizado. Para tanto, é gerado um conjunto de equações ordinárias no tempo definidas para a posição, temperatura e massa de cada espécie. Tais equações

são integradas, permitindo, assim, obter o comportamento das partículas ao longo do domínio. Logo, a fase particulada não é modelada como uma fase Euleriana extra.

O deslocamento da partícula tem como base a integração de Euler direta com a velocidade da partícula ao longo do passo de tempo definido. A velocidade da partícula e seu deslocamento são calculadas por, respectivamente:

$$\mathbf{U}_p = \left(\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} \right) \quad (3.28)$$

$$\mathbf{x}_p^n = \mathbf{x}_p^o + \mathbf{U}_p^o \delta t \quad (3.29)$$

Onde o sobrescrito n corresponde ao novo valor e o ao antigo. O \mathbf{U}_p^o refere-se ao valor inicial da velocidade da partícula. O valor da velocidade calculada é atribuído ao longo de todo o passo de tempo, sendo modificado apenas ao final do passo de tempo conforme a Equação (3.30).

$$m_p \frac{d\mathbf{U}_p}{dt} = F_{all} \quad (3.30)$$

Onde, m_p e \mathbf{U}_p correspondem a massa e a velocidade da partícula, F_{all} é a soma das forças que atuam numa partícula. No presente trabalho as forças atuantes são representadas pelas forças de arraste (\mathbf{F}_D) e de empuxo (\mathbf{F}_B) devido à diferença de densidade e ação da gravidade.

No que diz respeito a transferência de calor, esta tem sido governada pela transferência de calor convectivo e latente, este último também relacionado à transferência de massa. A equação que expressa a transferência de calor é dada por:

$$m_p C_p \frac{dT_p}{dt} = \pi d_p \lambda Nu (T_F - T_p) + \frac{dm_p}{dt} \Delta H^{vap} \quad (3.31)$$

Onde, C_p refere-se a capacidade calorífica à pressão constante da substância que compõe a fase particulada, T_p e T_F a temperatura da partícula e do fluido, ou fase contínua, respectivamente, e ΔH^{vap} o calor latente de vaporização. Nu corresponde ao número de Nusselt expresso por:

$$Nu = 2 + 0.6 Re^{0.5} \left(\mu \frac{C_P}{\lambda} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.32)$$

O μ é a viscosidade dinâmica do fluido.

3.2.2 Modelo de arraste e de empuxo

A força de arraste relacionada a fase contínua é calculada pela seguinte expressão:

$$\mathbf{F}_D = \frac{1}{2} C_D \rho_F A_F |\mathbf{U}_F - \mathbf{U}_P| (\mathbf{U}_F - \mathbf{U}_P) \quad (3.33)$$

Sendo C_D o coeficiente de arraste, ρ_F a densidade do fluido, A_F a seção transversal efetiva da partícula, \mathbf{U}_F a velocidade do fluido. O modelo utilizado para o cálculo do coeficiente de arraste foi o de Schiller Naumann, conforme expresso pela Equação (3.34).

$$\begin{cases} C_D = \max\left(\frac{24}{Re}(1 + 0.15Re^{0.0687})\right), & se \ Re < 1000 \\ C_D = 0.44, & se \ 1000 \leq Re \leq 1 - 2 \times 10^5 \end{cases} \quad (3.34)$$

Quanto a força de flutuação, ou empuxo, ela expressa a força que atua numa partícula que se encontra imersa num fluido. Tal força é representada pela Equação (3.35) a seguir:

$$\mathbf{F}_B = \frac{\pi}{6} d_p^3 (\rho_P - \rho_F) \mathbf{g} \quad (3.35)$$

Onde \mathbf{g} representa o vetor gravidade.

3.2.3 Modelo de turbulência

Dentre os modelos de turbulência disponíveis, encontra-se o modelo SST (*Shear Stress Transport*) que interpola entre os modelos $k - \omega$ e $k - \varepsilon$ conforme a distância da parede mais próxima. O tratamento feito leva em consideração a performance de ambos os modelos mediante a distância de uma superfície. O

modelo $k - \omega$ trata dos fluxos próximos a uma superfície (ou parede), enquanto que o $k - \varepsilon$ realiza o tratamento para fluxos distantes de superfícies. Tal abordagem foi desenvolvida por Menter (1994) que parte do modelo *Baseline* (BSL) e toma o modelo $k - \varepsilon$ para transformá-lo em um modelo $k - \omega$ de Wilcok.

O modelo $k - \omega$ de Wilcok, ou seja, o cálculo da energia cinética turbulenta e da taxa de dissipação turbulenta, é descrito pelo Guide do ANSYS CFX (2020) e expresso por:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k1}} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \beta' \rho k \omega \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j \omega) \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 1}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha_1 \frac{\omega}{k} P_k - \beta_1 \rho \omega^2 \end{aligned} \quad (3.37)$$

E, então, segue o modelo $k - \varepsilon$ transformado:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k2}} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \beta' \rho k \omega \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j \omega) \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 2}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \\ + \alpha_2 \frac{\omega}{k} P_k - \beta_2 \rho \omega^2 \end{aligned} \quad (3.39)$$

Os termos das equações (3.37) e (3.39) são os mesmos. Do lado esquerdo da igualdade observa-se a derivada temporal seguida do termo de convecção, e do lado direito da igualdade o termo de difusão seguido dos termos de produção e dissipação. Porém, na Equação (3.39) encontra-se um termo a mais $\left(2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right)$ (WIMSHURST, 2019).

As equações de Wilcok são, então, multiplicadas por uma função de mistura F_1 , enquanto que o modelo $k - \varepsilon$ transformado é multiplicado por $1 - F_1$. Pode-se dizer que surge um novo modelo BSL, o qual é expresso pela Equação (3.40), que conta com coeficientes resultantes da interpolação linear dos coeficientes

dos modelos subjacentes. Ou seja, o termo Φ_1 corresponde à constante do modelo (Eq.(3.40)) no modelo $k - \omega$, e o Φ_2 no modelo $k - \varepsilon$.

$$\Phi_3 = F_1 \Phi_1 + (1 - F_1) \Phi_2 \quad (3.40)$$

Para facilitar a compreensão, dado o termo adicional da equação da taxa de dissipação turbulenta do modelo $k - \varepsilon$ $\left(2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}\right)$, a multiplicação deste termo a expressão $(1 - F_1)$ resulta em uma expressão que transita suavemente entre os modelos $k - \varepsilon$ e $k - \omega$. A função de mistura F_1 pode exercer valores entre 0 e 1, no caso de F_1 ser igual a 0, o termo adicional da Equação (3.39) existirá, logo se aplicará a equação da taxa de dissipação turbulenta do modelo $k - \varepsilon$. Já no caso de F_1 ser igual a 1, o modelo que tomará lugar será o $k - \omega$, pois o termo adicional será anulado (WIMSHURST, 2019).

Esta transição entre modelos a partir da função de mistura será moldada conforme a proximidade à uma parede mediante a precisão dos modelos no tratamento próximo e distante de uma superfície (ou parede), sendo regulados pela função F_1 . Logo, pode-se dizer que cada célula do *mesh* possui diferentes valores da função F_1 .

Os coeficientes e seus respectivos valores para o modelo SST estão representados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Coeficientes utilizados no modelo SST e seus respectivos valores.

Coeficiente	Valor
β'	0.09
α_1	5/9
β_1	0.075
σ_{k1}	1.176
$\sigma_{\omega 1}$	2
α_2	0.44
β_2	0.0828
σ_{k2}	1
$\sigma_{\omega 2}$	1/0.856

Onde μ_t corresponde a viscosidade turbulenta (Eq. (3.41)), P_k refere-se a produção da taxa de turbulência associada a energia cinética (Eq.(3.42)), ρ e \mathbf{U}

(vetor velocidade) são tratados como conhecidas pelas equações de Navier-Stokes.

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \quad (3.41)$$

$$P_\omega = \frac{\alpha_3}{\nu_t} P_k \quad (3.42)$$

As funções de mistura F_1 e F_2 são dadas por:

$$F_1 = \tanh(\arg_1^4) \quad (3.43)$$

$$F_2 = \tanh(\arg_2^2) \quad (3.44)$$

Sendo:

$$\arg_1 = \min \left(\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho k}{CD_{k\omega} \sigma_{\omega 2} y^2} \right) \quad (3.45)$$

$$CD_{k\omega} = \max \left(2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 1.0 \times 10^{-10} \right) \quad (3.46)$$

$$\arg_2 = \max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{500\nu}{y^2 \omega} \quad (3.47)$$

Como mencionado, o modelo SST parte do modelo BSL, a diferença está no fato de o modelo SST redefinir o cálculo da viscosidade turbulenta (ν_t) para levar em consideração a tensão de cisalhamento turbulenta, adequando o comportamento de transporte por meio deste limitador, a viscosidade cinemática.

$$\nu_t = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, SF_2)} \quad (3.48)$$

$$\nu_t = \frac{\mu_t}{\rho} \quad (3.49)$$

A Equação (3.48) é aplicada ao modelo SST. No caso de o valor da função de mistura F_2 ou o S , que é a magnitude da tensão de cisalhamento, ou o produto de $F_2 S$ ser grande, a Eq. (3.48) reduz-se à Eq. (3.49). E no caso de ser menor, retorna ao que era. A função de mistura F_2 , semelhantemente a F_1 , depende da distância da parede mais próxima, calibrando, desta forma, a viscosidade cinemática, fazendo transitar suavemente entre as Equações (3.48) e (3.49).

3.2.4 Modelos de transferência de calor e quebra de gota

Dentre as correlações disponíveis no ANSYS CFX para o cálculo do coeficiente de transferência de calor na interface da partícula, encontra-se o modelo Ranz-Marshall representado pela seguinte correlação:

$$Nu = 2 + 0.6Re^{0.5}Pr^{0.3}$$

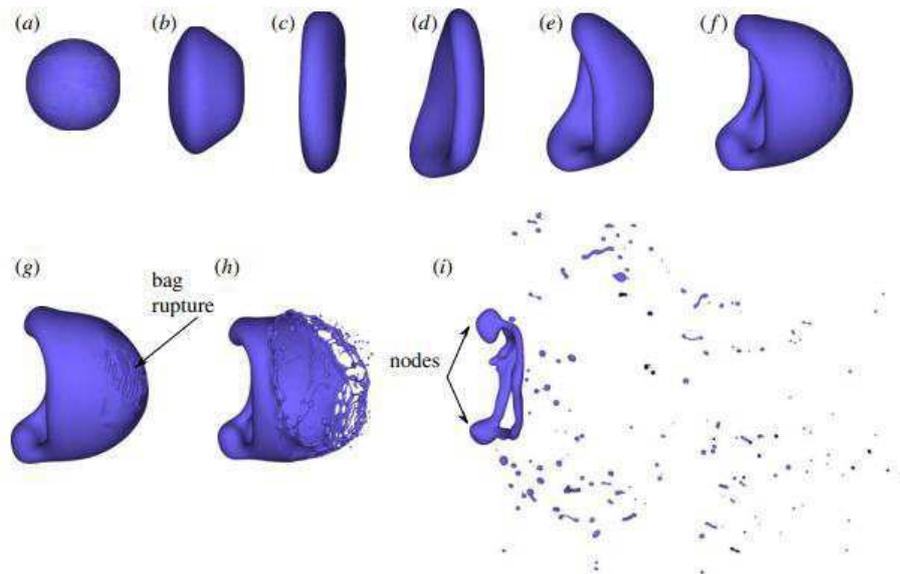
$$0 \leq Re < 200 \quad (3.50)$$

$$0 \leq Pr < 250$$

Já para modelar a quebra da gota, o modelo de Reitz e Diwakar leva em consideração dois regimes de quebra um denominado *bag* e outro *stripping* ou *shear stripping*. Liu e Reitz (1997) descrevem e apresentam imagens experimentais dos dois regimes em seu trabalho. O regime *bag breakup* pode ser visualizado na Figura 3-2, e é retratado como característico de uma corrente de ar de velocidade relativamente baixa que achata cada vez mais a gota ao passo que esta acelera dada uma velocidade relativa crítica. A gota passa a ficar fina de forma a apresentar uma superfície côncava tomando forma de uma bolsa. A gota segue sendo esticada e ficando mais e mais fina. A bolsa formada encontra-se presa à uma borda toroidal, ou nós. Buracos começam a surgir na superfície onde a gota está sendo esticada, formando-se ligamentos finos. Então, a gota é varrida a jusante e os ligamentos finos que foram formados se dividem dando origem às gotículas (LIU e REITZ, 1997; JAIN et al., 2015).

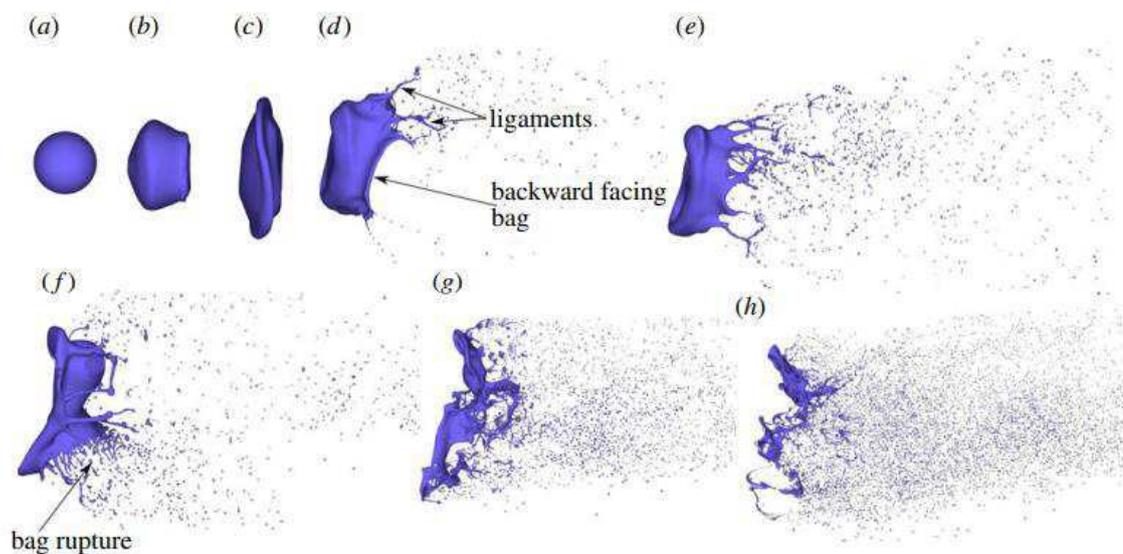
O regime *stripping breakup* (Figura 3-3), por sua vez, ocorre para elevados números de Weber. Liu e Reitz (1997) relatam que neste regime a quebra da gota ocorre nas bordas equatoriais da gota achatada mediante o aumento cada vez maior da velocidade do ar. A gota segue sendo deformada, e forma-se uma superfície convexa com relação ao fluxo de ar (da esquerda para a direita). Conforme os autores, as bordas são caracterizadas por discos (Figura 3-3c) que, devido às forças de arrasto, vai se transformando em uma folha fina (Figura 3-3d) que em seguida se divide em pequenas gotas e finos ligamentos que se dividem em pequenas gotas.

Figura 3-2 – Imagens de uma simulação de quebra de gota no regime *bag breakup* para uma corrente de ar da esquerda para a direita.



Fonte: Jain et al. (2015)

Figura 3-3 - Imagens de uma simulação de quebra de gota no regime *stripping breakup* para uma corrente de air da esquerda para a direita.



Fonte: Jain et al. (2015)

Diferentemente do regime *bag breakup*, no regime *stripping breakup* não há a formação de uma borda toroidal que poderia levar a formação de um saco, isto

ocorre devido a remoção de líquido nas regiões periféricas da gota. A quantidade de gotículas que se desprende é tal que o tamanho da gota se reduz rapidamente juntamente com a redução do número efetivo de Weber. Assim é possível observar a quebra da gota por um regime de transição que resulta no regime *bag breakup* conforme observado nas etapas *e* e *f* (Figura 3-3).

A formulação matemática da correlação de Reitz e Diwakar no ANSYS CFX leva em consideração a quebra da gota caso exceda o número crítico de Weber da partícula, ou seja, o número de Weber no qual ocorre a desintegração da gota. Para ambos os regimes é considerado que o raio da gota diminui conforme a expressão a seguir:

$$\frac{dr_p}{dt} = \frac{-(r_p - r_{estável})}{t_{br}} \quad (3.51)$$

Onde r_p representa o raio da gota antes da quebra, $r_{estável}$ é o novo raio para uma gota estável, e t_{br} o tempo característico de quebra.

O regime *bag breakup* ocorre para $We > We_{crit}$, sendo os termos t_{br} e $r_{estável}$ calculados por:

$$t_{br} = C_1 \sqrt{\frac{\rho_p r_p^3}{2\sigma}} \quad (3.52)$$

$$r_{estável} = \frac{We_{crit}\sigma}{\rho_F v_{slip}^2} \quad (3.53)$$

C_1 corresponde ao fator de tempo para o regime *bag breakup*, σ a tensão superficial e v_{slip} a velocidade de deslizamento, ou seja, a diferença entre as velocidades médias do fluido e da partícula.

Já o regime *stripping breakup* ocorre quando $\frac{We}{\sqrt{Re}} > C_{s1}$, onde o C_{s1} representa o fator do número de Weber para o regime *stripping*. Neste caso, os termos t_{br} e $r_{estável}$ são calculados por:

$$t_{br} = C_2 \frac{r_p}{v_{slip}} \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho_F}} \quad (3.54)$$

$$r_{estável} = \frac{2C_{s1}^2\sigma^2}{\rho_F^2\nu_{slip}^3\nu_F} \quad (3.55)$$

Onde, C_2 é o fator tempo para o regime *stripping* e o ν_F a viscosidade cinemática do fluido (fase contínua).

3.2.5 Modelo de evaporação de líquido

Para a transferência de massa foi utilizado o modelo de evaporação de líquido (*Liquid Evaporation Model*). Este modelo leva em consideração a transferência de calor e massa, e faz uso de duas correlações de transferência de massa a depender da temperatura da gota com relação ao ponto de bolha. Se a pressão de vapor é maior que a pressão do gás ambiente, a partícula se encontrará em ebulição, então a correlação utilizada para calcular a transferência de massa no caso de a partícula se achar acima do ponto de ebulição, considera somente a transferência convectiva de calor, e é dada por:

$$\frac{dm_p}{dt} = -\frac{\pi d_p \lambda Nu (T_F - T_p)}{\Delta H^{vap}} \quad (3.56)$$

Caso a partícula se encontre abaixo do ponto de ebulição, a transferência de massa passa a ser calculada por:

$$\frac{dm_p}{dt} = \pi d_p \rho D Sh \frac{W_C}{W_F} \ln \left(\frac{1 - X_S^V}{1 - X_{vap}^V} \right) \quad (3.57)$$

Onde, ρD corresponde a difusividade dinâmica do componente na fase contínua, W_C e W_F são os pesos moleculares do vapor e da mistura na fase contínua, X_S^V e X_{vap}^V são as frações molar do componente na superfície da gota e na fase gasosa, e Sh o número de Sherwood expresso por:

$$Sh = 2 + 0.6Re^{0.5} \left(\frac{\mu}{\rho D} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.58)$$

CAPÍTULO 4 METODOLOGIA

CAPÍTULO 4 METODOLOGIA **65**

4.1	MODELAGEM NUMÉRICA	65
4.1.1	DOMÍNIO COMPUTACIONAL E MALHA	65
4.1.2	CONFIGURAÇÃO DA SIMULAÇÃO	69
4.1.3	ESTUDO DE DEPENDÊNCIA DE MALHA	70

O presente trabalho utilizou a técnica numérica de Fluidodinâmica Computacional (CFD) para simular os cenários de liberação bifásica para o estudo de classificação de áreas de risco. Para o desenvolvimento das simulações foram gerados o domínio computacional, a malha, e, em seguida, configurada a simulação baseado nas condições de contorno e nos modelos que descrevem os cenários desejados. Nos subtópicos seguintes serão detalhadas cada etapa destas e como elas foram configuradas.

4.1 MODELAGEM NUMÉRICA

Baseado nos modelos descritos anteriormente, os mesmos serão contextualizados na configuração das simulações desenvolvidas neste trabalho.

4.1.1 Domínio computacional e malha

No presente trabalho o domínio computacional considerado representou a metade do domínio de estudo, cujas dimensões e condições de contorno encontram-se ilustradas na Figura 4-1, o termo “H” correspondente à altura do domínio que foi variado conforme a altura do orifício de liberação “h” definida nos casos. A largura “L” do domínio foi estabelecida conforme o caso simulado, variando de 3 m a 10 m. O comprimento do domínio “C” variou até 25 m conforme

a necessidade do caso ao tratar diferentes valores da velocidade do vento e do sentido do vento. O diâmetro de liberação utilizado corresponde ao diâmetro expandido na região de pós-expansão, e variou conforme as condições de armazenamento e a condição do fluxo no orifício de liberação.

Para a construção da geometria foi utilizada a ferramenta *Design Modeler* do software ANSYS 2020R2. A geometria (Figura 4-2) contou com um cone nas proximidades do orifício de liberação visando um maior refinamento da malha nessa região. O diâmetro de orifício considerado foi o diâmetro expandido d_e , que corresponde ao diâmetro na região de pós-expansão, também conhecida como pseudofonte, e foi tratada como *inlet* por onde atravessa o fluxo bifásico. Adotou-se a condição de simetria no plano onde há o orifício de liberação. Em todo o ambiente foi considerada a condição *opening*, enquanto para o chão foi dada a condição *wall*. O efeito gravitacional e de solo foram considerados, fornecendo um tratamento mais realístico aos casos simulados. O solo foi desconsiderado apenas nas simulações na condição de jato livre, em vez disso foi tratado como *opening*.

Para a geração de malha foi utilizado o ANSYS *Meshing*. A malha utilizada (Figura 4-3) foi não estruturada e contou com aproximadamente 23,080,413 elementos de malha e 4,813,722, número de nós, valor este baseado em uma análise de dependência de malha apresentada no tópico 4.1.3 adiante. Durante o desenvolvimento do presente trabalho foi variado tanto a altura como o diâmetro do orifício, o que implica dizer que a malha variou entre os casos em torno do número de nós e elementos mencionados.

Como explicado anteriormente, o cone nas proximidades do orifício teve o intuito de um maior refinamento nesta região, o mesmo foi feito nas proximidades do solo a partir do aumento no número de camadas de refinamento (Figura 4-3). O refinamento no solo se deu devido ao comportamento da pluma de flutuação negativa (empuxo negativo) característico de nuvens densas.

Figura 4-1 - Domínio computacional e suas respectivas condições de contorno (figura ilustrativa das condições de contorno).

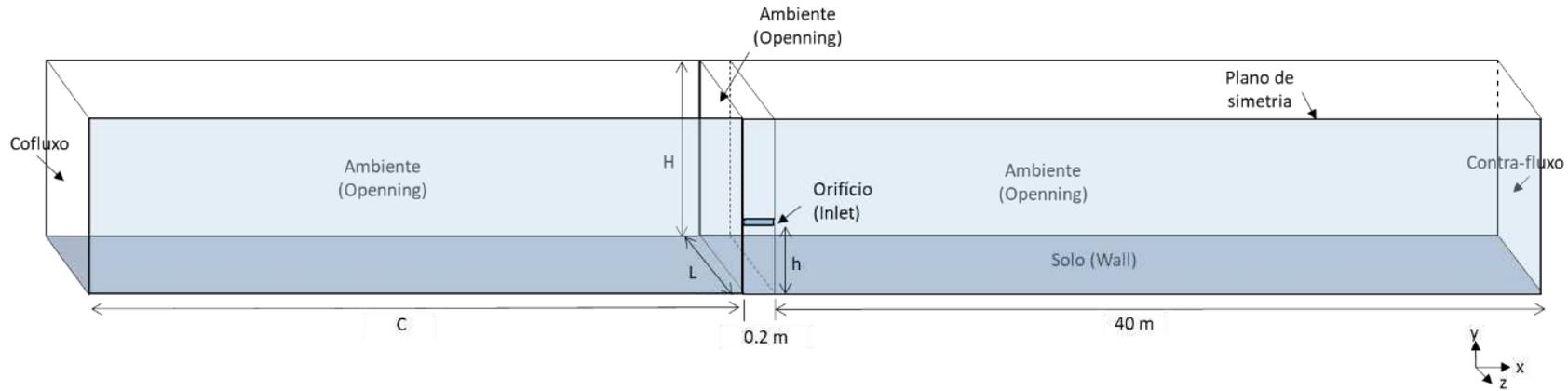


Figura 4-2 - Vista da geometria construída.

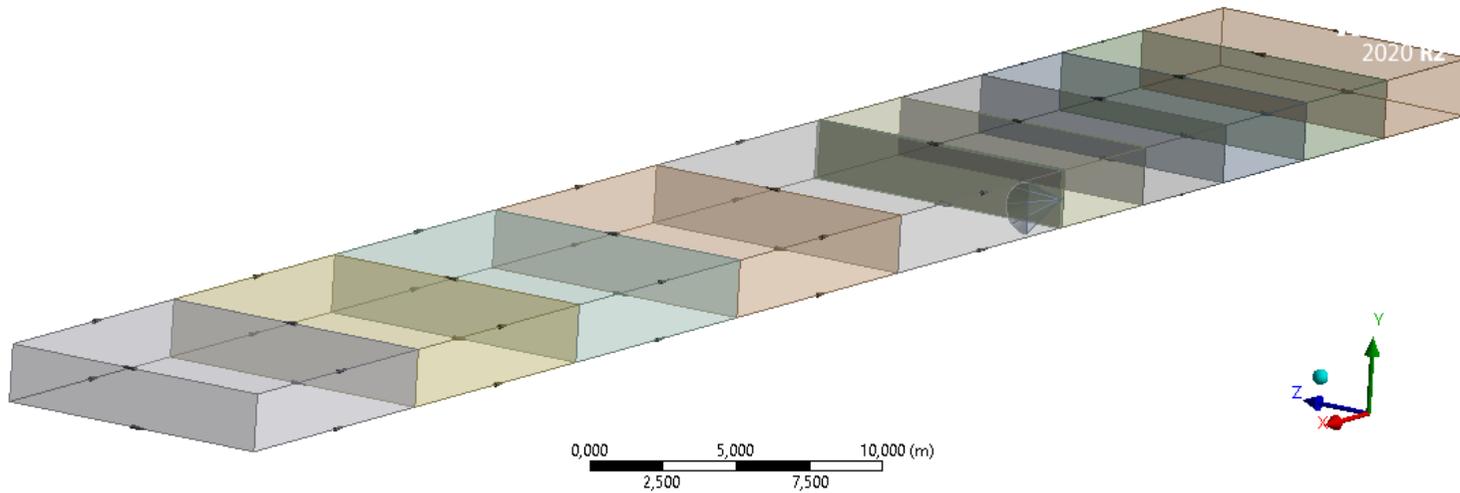
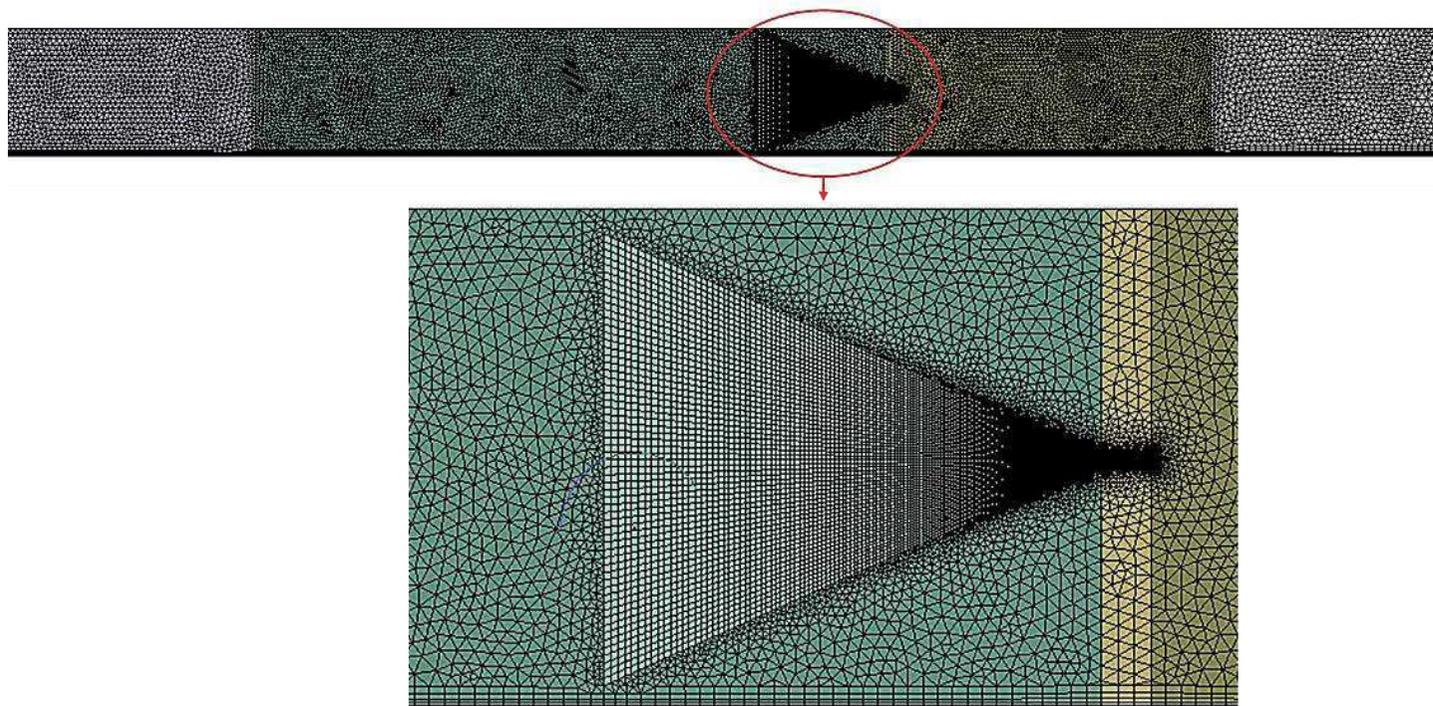


Figura 4-3 - Parte da malha gerada, e o refinamento aplicado nas proximidades do orifício e do solo.



4.1.2 Configuração da simulação

Para a configuração da simulação foi utilizado o software ANSYS CFX 2020R2. A abordagem numérica utilizada foi a Euleriana-Lagrangeana para simular os cenários de liberação bifásica do presente trabalho, que contou com 500 partículas computacionais simuladas, sendo a quantidade escolhida com base na análise de sensibilidade descrita no trabalho de Barros (2020). O modelo utilizado nos cálculos de transferência de massa na etapa de evaporação da gota foi o Modelo de Evaporação de Líquido, já para a obtenção do coeficiente de transferência de calor na interface da gotícula, foi aplicada a correlação de Ranz-Marshall. O modelo de Reitz e Diwakar foi empregado para calcular a quebra da partícula líquida, e o modelo de Schiller Naumann para obter o coeficiente de arraste. Quanto ao modelo de turbulência adotou-se o SST (*Shear Stress Transport*) para a fase contínua. O efeito da gravidade foi considerado, e foi habilitado o modelo *Buyant*. No que diz respeito ao acoplamento de partículas, considerou-se as partículas totalmente acopladas à fase contínua (*Fully coupled*), o que significa dizer que a fase particulada troca momento com a fase contínua, havendo a interferência do fluxo da fase contínua nas partículas, e vice-versa (ANSYS CFX, 2020).

Para o cálculo dos termos de advecção nas equações de volume finito discreto foi selecionado o *High Resolution*, e o *First Upwind* na resolução dos termos de turbulência. O passo de tempo considerado foi de 1×10^{-5} até 20 iterações, e acima de 20 iterações o passo de tempo aplicado foi 5×10^{-4} . O critério de convergência adotado foi 1×10^{-5} para os resíduos RMS e para o *Imbalance* 1%, critério que avalia a conservação dos balanços.

No que diz respeito às condições de contorno utilizadas e previamente ilustrada na Figura 4-1, as configurações empregadas encontra-se detalhadas na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 - Configuração das condições de contorno.

Condição de contorno	Tipo	Configuração
Orifício	<i>Inlet</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Regime de fluxo subsônico; • Velocidade normal ao orifício (<i>normal speed</i>); • Turbulência: zero gradiente; • Fração mássica de propano: 1 (somente propano na entrada); • Gotículas de líquido na entrada injetadas uniformemente; • Distribuição uniforme do diâmetro da gotícula; • 500 partículas computacionais.
Ambiente	<i>Opening</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Regime de fluxo subsônico; • Opening Pressure, Direction e Temperature: Pressão (1 atm), normal ao ambiente, Temperatura 298.15K; • Turbulência: zero gradiente; • Fração mássica de propano: 0 (sem propano no ambiente). <p><i>Opening:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Regime de fluxo subsônico; • Opening Pressure, Direction e Temperature: Pressão (1 atm), normal ao ambiente, Temperatura 298.15 K, respectivamente; • Turbulência: zero gradiente; • Fração mássica de propano: 0 (sem propano no ambiente).
<i>Cofluxo e contra-fluxo</i>	<i>Opening ou Inlet</i>	<p><i>Inlet:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Regime de fluxo subsônico; • Velocidade: no plano cartesiano (indicado o sentido da velocidade do vento); • Turbulência: zero gradiente; • Fração mássica de propano: 0 (sem propano neste contorno); • Temperatura 298.15 K.
Solo	<i>Wall</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Condição de não deslizamento de parede (chão); • Sem rugosidade; • Interação das gotículas com o chão: configuração do coeficiente de restituição (coeficientes perpendicular e paralelo, 0.01 e 1, respectivamente).
Simetria	<i>Symmetry</i>	-

4.1.3 Estudo de dependência de malha

Para a escolha da malha utilizada nas simulações foi realizado um teste de dependência de malha. As malhas foram variadas com refinamentos ao longo

de todo o domínio, bem como nas proximidades do orifício de liberação, mais especificamente na região do cone. Três malhas foram testadas e comparadas para as mesmas condições de contorno, sendo avaliadas com relação aos resultados de extensão e volume da nuvem de gás formada, tempo computacional, convergência e perfil de temperatura do gás ao longo do eixo de liberação do jato. O critério de convergência corresponde ao mencionado no tópico anterior.

O cenário de liberação levou em consideração a liberação de propano liquefeito armazenado sob uma pressão de 14 bar através do maior diâmetro de orifício de liberação mencionado na norma internacional IEC 60079-10-1 (2020) (2.5 mm). A altura do orifício ao solo foi de 0.5 m. Os valores relacionados as condições de contorno na região de pós-expansão encontram-se na Tabela 4.2, para a condição de líquido superaquecido no orifício de liberação. Os resultados obtidos a partir das simulações para a análise de dependência, encontram-se descritos na Tabela 4.3.

As malhas testadas apresentaram resultados de extensão e volume da nuvem de gás aproximadamente iguais. Porém as diferenças encontram-se no tempo e na convergência da simulação. A Malha 3 é a que apresenta a menor quantidade de elementos de malha, totalizando 21,468,893, porém com a simulação não convergida além dos ruídos observados no RMS ao longo do tempo de simulação, a Malha 3 foi desconsiderada. Entre a Malha 1 e 2, a Malha 2 foi a selecionada para ser utilizada nas simulações dado o tempo de simulação ser consideravelmente menor do que o observado pela Malha 1. A diferença observada se dá pela quantidade de elementos de malha ser menor na Malha 2 do que na 1, o que reduz o esforço computacional e, conseqüentemente, o tempo de simulação.

Tabela 4.2 - Condições de contorno no pós-expansão.

Parâmetros	Valor
Taxa de fluxo mássico (kg/s)	0.17
Velocidade do fluxo (m/s)	74.65
Temperatura (K)	231.11
Fração de líquido (-)	0.46
Diâmetro expandido (mm)	26
Diâmetro de gota (μm)	71.88

Tabela 4.3 - Análise de dependência de malha

Malha/ Informações da simulação	Malha 1	Malha 2	Malha 3
Número de elementos	24.690.501	20.908.179	17.789.875
Número de nós	5.327.212	4.349.374	3.679.018
Quantidade de iterações numéricas	7791	8121	7927
Tempo de simulação	21 dias 18h 9min 43s	14 dias 23h 22min 51s	14 dias 1h 53min 7s
Convergência			
RMS	< 1E-05	< 1E-05	> 1E-05
<i>Imbalance</i>	< 1%	< 1%	< 1%
Resultados			
Extensão no LEL (m)	11.72	11.66	11.69
Extensão em ½ LEL (m)	21.22	21.06	21
Extensão em ¼ LEL (m)	34.61	34.43	34.27
Volume no LEL (m³)	4.77	4.76	4.76
Volume em ½ LEL (m³)	33.82	33.79	33.58
Volume em ¼ LEL (m³)	200.92	201.18	200.2

CAPÍTULO 5 ESTUDOS DE CASO

<u>CAPÍTULO 5 ESTUDOS DE CASO</u>	73
5.1 VALIDAÇÃO DO MODELO DE CFD	74
5.1.1 COLDRICK (2016)	74
5.1.2 PROJETO FLIE – INERIS	75
5.2 ANÁLISE DAS LIBERAÇÕES BIFÁSICAS: EQUILÍBRIO E NÃO-EQUILÍBRIO	77
5.3 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE PARA LIBERAÇÕES BIFÁSICAS	78

O presente estudo trata da liberação bifásica de propano armazenado em sua forma liquefeita sob pressão. Duas condições no orifício de liberação foram abordadas sendo elas as condições de equilíbrio termodinâmico e a de não-equilíbrio. Uma análise de sensibilidade foi efetuada para cada condição no orifício, e os valores das condições de armazenamento e de pós-expansão encontram-se destacados nas tabelas em ANEXO, para cada condição.

Os ranges selecionados para os parâmetros das análises de sensibilidade tiveram como base a norma internacional IEC 60079-10-1 (2020) para o tamanho do orifício de liberação. Conforme sugere a norma, ao descrever seções transversais de furos para liberações secundárias, o pior caso corresponde à furos com até 5 mm² o que resulta em diâmetros de aproximadamente 2.5 mm.

Quanto ao range da pressão de armazenamento teve como base o componente simulado (propano) e as condições normalmente empregada na indústria para o armazenamento de propano liquefeito dadas as temperaturas de 20^o e 50^o, sendo, também, observadas as condições no diagrama de fase do componente.

O intervalo de velocidade do vento teve como base o reportado pela indústria e observado em dados e históricos meteorológico, observados no projeto desenvolvido, cujo trabalho é parte dele.

5.1 VALIDAÇÃO DO MODELO DE CFD

A validação do modelo em CFD foi realizada contra dados da literatura sendo eles o trabalho de Coldrick (2016), que teve como base de dados experimentais o trabalho de Allen (1995) para uma liberação bifásica de propano. E os trabalhos de Lacome et al. (2020) e Ichard (2012), que teve como dados experimentais os gerados pelo projeto FLIE (*Flashing Liquids in Industrial Environment*) desenvolvido pelo instituto francês INERIS (*Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques*), para investigar as propriedades de um jato *flashing* em uma liberação bifásica de propano e butano, sendo o butano o selecionado para validar o modelo CFD do presente trabalho.

Os resultados de validação também foram comparados ao trabalho de Anjos (2021) que reproduziu os mesmos casos via modelagem matemática em ambiente MATLAB®.

5.1.1 Coldrick (2016)

No primeiro caso de validação baseado em Coldrick (2016), simulou-se a emissão e dispersão, em regime estacionário, de propano em condições de saturação, através de um tubo de 4 mm de diâmetro. A pressão e temperatura de armazenamento do experimento foram de 6.47 bar e 288.8 K, e a temperatura do ambiente de liberação de 288.8 K. O orifício de liberação encontrou-se posicionado a 1 m do solo. A condição de pós-expansão foi adotada nas simulações do presente trabalho, sendo considerados os dados de pós-expansão para a configuração das simulações CFD. Os valores expressos no trabalho do autor estão descritos na Tabela 5.1, e foram utilizados nas simulações.

Tabela 5.1 - Valores dos parâmetros de entrada na condição de pós-expansão.

Parâmetros	Valores
Taxa de fluxo mássico ($\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$)	0.0692

(Continua..)

Tabela 5.1 (Continuação...)

Parâmetros	Valores
Velocidade do fluxo (m.s ⁻¹)	124.56
Temperatura (K)	231.08
Fração de líquido	0.69
Diâmetro expandido (mm)	9.6
Diâmetro de gota (μm)	193 e 20

Como é possível observar, dois tamanhos do diâmetro de gota foram simulados e comparados com os dados do artigo base. Também foi utilizado o modelo de distribuição do diâmetro de partículas de Rosin Rammler, sendo aplicado o índice de uniformidade igual a 2, e um ângulo de injeção das partículas de 14.54°.

5.1.2 Projeto FLIE – INERIS

Na segunda validação também foram simuladas a emissão e dispersão em estado estacionário para o butano, que contou com a simulação de dois dos testes realizados no FLIE-INERIS, cujos experimentos se deram com a liberação de um jato horizontal de gás butano liquefeito pressurizado para a atmosfera de temperatura ambiente de 23°C. Os parâmetros associados às condições de armazenamento e pós-expansão encontram-se nas Tabela 5.2 e Tabela 5.3.

Tabela 5.2 - Valores dos parâmetros nas condições de armazenamento e de pós-expansão (Caso 1).

Parâmetros	Valores
Diâmetro real do orifício (mm)	10
Altura do orifício ao solo (m)	1.5
Pressão de armazenamento (bar)	7.6
Temperatura de armazenamento	19.3
Temperatura ambiente (K)	296.15
Velocidade do vento (m.s ⁻¹)	1

(Continua..)

Tabela 5.2 (Continuação...)

Parâmetros	Valores
Taxa de fluxo mássico (kg.s^{-1})	1.33
Condições no pós-expansão	
Fração de líquido	0.83
Velocidade do fluxo (m.s^{-1})	29.5
Diâmetro expandido (mm)	63
Temperatura (K)	231.08
Diâmetro de gota (μm)	100

Fonte: Lacombe et al. (2020)

Tabela 5.3 - Valores dos parâmetros nas condições de armazenamento e de pós-expansão (Caso 2).

Parâmetros	Valores
Diâmetro real do orifício (mm)	5
Altura do orifício ao solo (m)	1.5
Pressão de armazenamento (bar)	3.56
Temperatura de armazenamento	19.5
Temperatura ambiente (K)	296.15
Velocidade do vento (m.s^{-1})	1
Taxa de fluxo mássico (kg.s^{-1})	0.1613
Condições no pós-expansão	
Fração de líquido	0.87
Velocidade do fluxo (m.s^{-1})	35.44
Diâmetro expandido (mm)	17.4
Temperatura (K)	231.08
Diâmetro de gota (μm)	258.09

5.2 ANÁLISE DAS LIBERAÇÕES BIFÁSICAS: EQUILÍBRIO E NÃO-EQUILÍBRIO

Visando aprimorar o entendimento das duas condições de uma liberação bifásica, foram realizadas simulações em que as duas condições de liberação apresentam os mesmos valores de pressão de armazenamento, diâmetro do orifício de liberação e velocidade do vento.

Nesta etapa quatro condições foram simuladas e avaliados os comportamentos da nuvem de gás formada. Na Tabela 5.4 encontram-se as características da liberação de propano liquefeito pressurizado dada as condições no orifício de liberação, ou seja, em equilíbrio e não-equilíbrio. A altura da fonte de liberação foi de 0.5 m do solo, e as simulações partem da região de pós-expansão.

Tabela 5.4 - Valores dos parâmetros que caracterizam a liberação e o pós-expansão dada a condição do jato no orifício.

Parâmetros	1	2	3	4
Pressão de armazenamento (bar)	20	14	14	14
Diâmetro de orifício (mm)	1.3	1.3	2.5	1.3
Velocidade do vento (m/s)	0	0	0	2
<i>Equilíbrio homogêneo</i>				
Taxa de fluxo mássico (kg/s)	0.0146	0.0122	0.0451	0.0122
Velocidade do fluxo (m/s)	200.5496	164.2791	164.2791	164.2791
Temperatura do fluxo (K)	231.11	231.11	231.11	231.11
Fração de líquido	0.0119	0.3166	0.3166	0.3166
Diâmetro expandido (mm)	6.3	5.3	10.1	5.3
Diâmetro de gota (μm)	70.8857	72.4435	72.3878	72.4435
<i>Não-equilíbrio</i>				
Taxa de fluxo mássico (kg/s)	0.0539	0.0462	0.1708	0.0462
Velocidade do fluxo (m/s)	93.4684	74.652	74.652	74.652
Temperatura do fluxo (K)	231.11	231.11	231.11	231.11
Fração de líquido	0.3153	0.4614	0.4614	0.4614
Diâmetro expandido (mm)	14.7	13.5	26.0	13.5
Diâmetro de gota (μm)	47.5876	65.3935	71.8792	65.3935

5.3 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE PARA LIBERAÇÕES BIFÁSICAS

Para a análise de sensibilidade levou-se em consideração a liberação de propano armazenado em sua forma liquefeita sob pressão, e foi desenvolvida para ambos os cenários do jato de liberação na condição de equilíbrio termodinâmico (jato bifásico no orifício) e de não-equilíbrio no orifício (jato de líquido superaquecido no orifício). Os parâmetro de análise correspondem à pressão de armazenamento (P_s), diâmetro de orifício (d_o), velocidade do vento (u_w), altura do orifício ao solo (h) e concentração (LEL). Na Tabela 5.5 estão expressos os intervalos de avaliação para cada parâmetro. O sinal negativo utilizado para a velocidade do vento indica vento contrário ao jato de liberação, ou seja, contra fluxo.

As condições ambientes empregadas foram de 1 atm e 298.15 K. A análise de sensibilidade foi feita para três alturas distintas: 0.5, 1.0 e 2.0 m, e para a condição de jato livre. Os valores dos parâmetros no ponto médio (14 bar para a pressão, 1.3 mm para o diâmetro do orifício e velocidade do vento 0) foram fixados e apenas variado o parâmetro de interesse.

Tabela 5.5 - Intervalo dos parâmetros de entrada para a análise de sensibilidade.

Parâmetros	Intervalo
Pressão de armazenamento (bar)	8 – 20
Diâmetro de orifício (mm)	0.1 – 2.5
Velocidade do vento (m/s)	-5 – 5
Altura (m)	0.25 – 7.0

Os parâmetros utilizados para configurar as simulações CFD foram calculados a partir dos parâmetros de entrada expressos na Tabela 5.5. Os parâmetros de configuração da simulação são: fluxo mássico, temperatura do jato, velocidade do fluxo, diâmetro expandido, fração de líquido e diâmetro de gota. Os valores de cada parâmetro dada as condições entrada (pressão de armazenamento e diâmetro de orifício) estão disponíveis em ANEXO, onde, logo após cada tabela com os parâmetros de entrada, segue a tabela com os resultados dos respectivos casos simulados em CFD, avaliados nas concentrações do LEL do propano (2.1%), $\frac{1}{2}$ LEL e $\frac{1}{4}$ LEL.

CAPÍTULO 6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

<u>CAPÍTULO 6</u>	<u>RESULTADOS E DISCUSSÕES</u>	<u>79</u>
6.1	VALIDAÇÃO DO MODELO	80
6.1.1	COLDRICK (2016)	80
6.1.2	PROJETO FLIE – INERIS	81
6.2	ANÁLISE DAS LIBERAÇÕES BIFÁSICAS – CONDIÇÕES DE EQUILÍBRIO E DE NÃO-EQUILÍBRIO	86
6.3	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE – CONDIÇÕES DE EQUILÍBRIO TERMODINÂMICO E DE NÃO-EQUILÍBRIO	91
6.3.1	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE: CONDIÇÃO DE NÃO-EQUILÍBRIO	91
6.3.2	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE: CONDIÇÃO EQUILÍBRIO TERMODINÂMICO	100
6.4	EFEITO DO SOLO E DA VELOCIDADE DO VENTO NO CENÁRIO DE UMA LIBERAÇÃO BIFÁSICA	106
6.5	CLASSIFICAÇÃO DE ÁREA: CFD VS IEC 60079-10-1	111

Os resultados obtidos ao longo do presente estudo serão descritos a seguir, e serão pautados conforme as duas abordagens do estado da substância no orifício de liberação, seguida da avaliação da influência dos referidos parâmetros da análise de sensibilidade. Para cada avaliação da análise de sensibilidade serão apresentados os modelos de regressão que melhor se ajustam aos resultados, e proposto um modelo aproximado conforme o comportamento dos parâmetros mediante a extensão e o volume da pluma. Resultados de validação e comparativos com outros modelos disponíveis na literatura também serão apresentados.

Por fim, dadas as contribuições no estudo de classificação de áreas quanto ao entendimento da influência dos parâmetros numa liberação bifásica e na nuvem de gás formada, em seguida é realizada a classificação de área propriamente dita para cada caso em estudo conforme a metodologia de

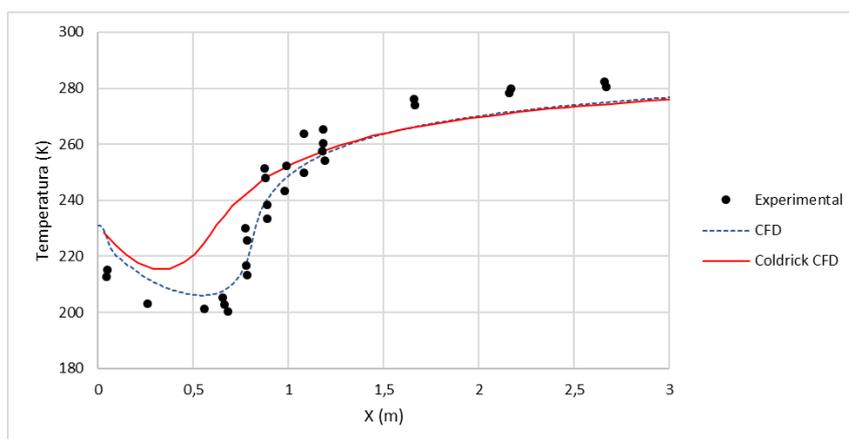
classificação descrita pela norma internacional IEC 60079-10-1 (2020). A classificação obtida mediante a obtenção da extensão e do volume de pluma baseado na norma, serão comparadas com os resultados obtidos em CFD.

6.1 VALIDAÇÃO DO MODELO

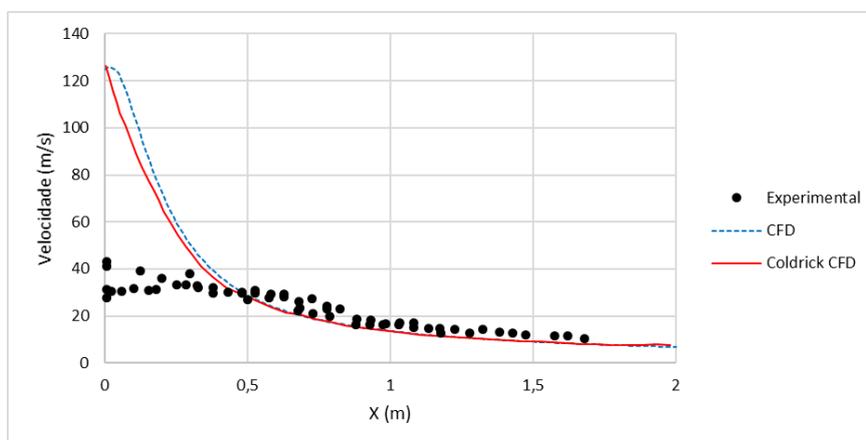
6.1.1 Coldrick (2016)

Os resultados avaliados para validação da modelagem CFD partindo do trabalho de Coldrick (2016) e, conseqüentemente, Allen (1995) consistiram nos perfis de temperatura e velocidade da fase vapor ao longo do eixo central de liberação.

Figura 6-1 - Perfis de temperatura e de velocidade da fase vapor ao longo do eixo central de liberação.



(a)



(b)

Conforme a Figura 6-1a, a simulação CFD foi capaz de prever o comportamento observado experimentalmente para o perfil de temperatura, sendo possível observar a queda de temperatura seguida do aumento até estabilizar na temperatura ambiente. Tal comportamento é característico de uma liberação *flashing* devido a abrupta despressurização que resulta em uma violenta evaporação das gotículas líquida, acompanhada da redução da temperatura abaixo do ponto de ebulição na pressão ambiente. Lacome et al. (2014) descreve que neste intervalo de queda de temperatura, o fluxo é dominado pela vaporização, havendo o aumento apenas quando a vaporização das gotículas líquida não influencia mais no fluxo.

Com relação ao perfil de velocidade (Figura 6-1b), o resultado em CFD se ajustou bem aos dados experimentais a partir de 0.5 m da liberação. O mesmo comportamento foi verificado pela simulação CFD de Coldrick (2016), que se ajustou bem ao perfil obtido no presente trabalho. Segundo Coldrick (2016), os valores baixos de velocidade dos pontos experimentais observados em $X < 0.5 \text{ m}$, podem estar associados à incertezas quanto ao estado do material no orifício de saída, o que possui implicação na velocidade de descarga.

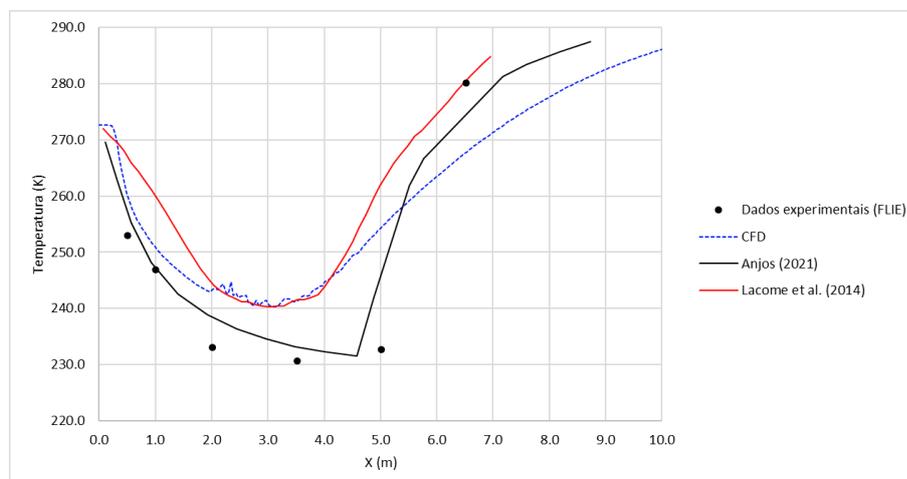
A diminuição gradativa da velocidade da mistura vapor da substância inflamável/ar ambiente é esperada dada a mistura do ar ambiente com o jato à medida que este flui, o que caracteriza a ação de *entrainment* do ar.

6.1.2 Projeto FLIE – INERIS

Caso 1

Como resultado comparativo, foi possível extrair o perfil de temperatura do gás ao longo do eixo central de liberação e comparar com os dados experimentais disponíveis, e com os modelos Lacome et al. (2014) e Anjos (2021) (Figura 6-2). Todos os modelos foram capazes de descrever a queda de temperatura prevista pelo fenômeno *flashing*.

Figura 6-2 - Perfil de temperatura da fase vapor ao longo do eixo central de liberação.

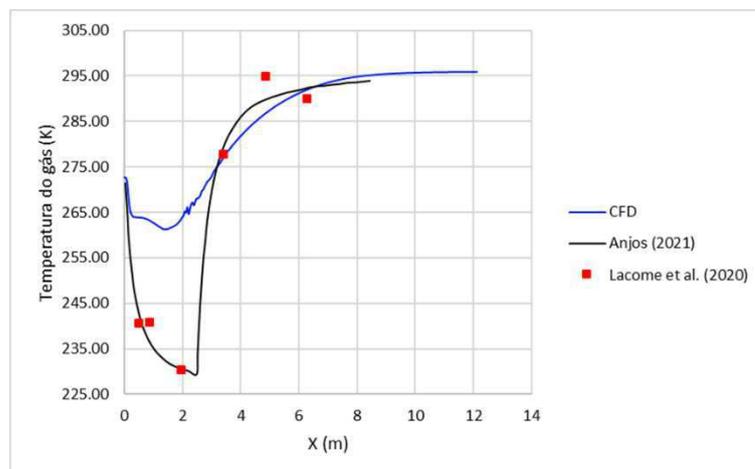


A partir da Figura 6-2 é possível observar que o perfil de temperatura obtido em CFD se aproximou ao obtido pelo modelo computacional do autor Lacomme et al. (2014), enquanto que o modelo de Anjos (2021) se ajustou bem aos dados experimentais. Tanto a curva CFD como a do modelo Lacomme et al. (2014) se apresentaram acima dos dados experimentais, se ajustando ao atingir a temperatura ambiente. A temperatura mínima de ambos foi de 240 K, enquanto que do experimental 230 K.

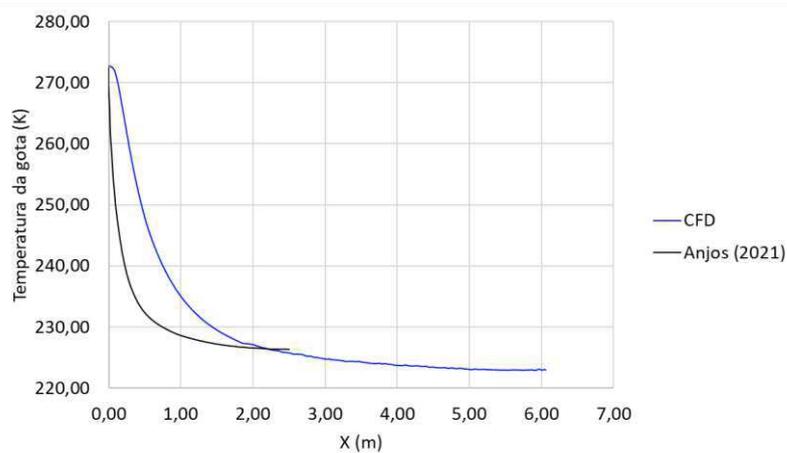
Caso 2

No Caso 2 foi possível analisar os resultados dos perfis de temperatura da fase vapor e das gotículas líquidas, bem como o perfil de velocidade do gás, todos avaliados no eixo central de liberação (Figura 6-3). Os resultados de extensão e volume da nuvem também foram observados nas concentrações de interesse e, então, comparados com os resultados obtidos por Anjos (2021), e utilizando os softwares EFFECTS e Quadvent 2 (Tabela 6.1).

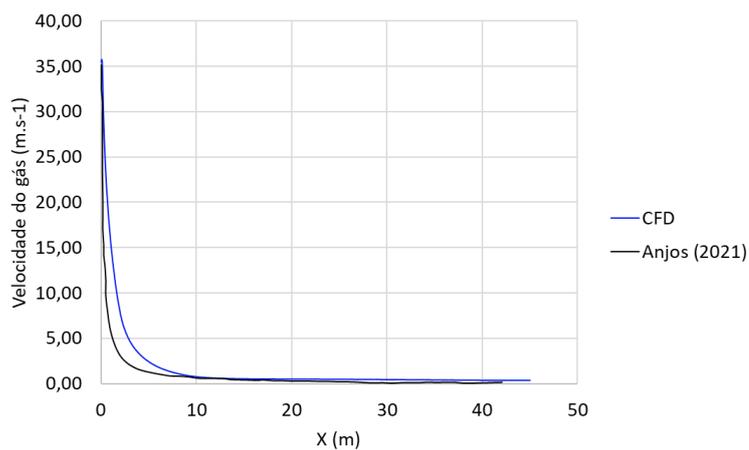
Figura 6-3 – Perfis de (a) temperatura do gás contendo os dados experimentais FLIE-INERIS, (b) temperatura da gotícula líquida, e (c) perfil de velocidade do gás.



(a)



(b)



(c)

Inicialmente, observando o perfil de temperatura do gás (Figura 6-3a), assim como verificado para o propano, o modelo CFD conseguiu prever a queda de

temperatura característica do *flashing*, porém nota-se que o modelo CFD não previu a queda de temperatura esperada e representada pelos dados experimentais. Anjos (2021), que também teve como base de ajuste e validação o presente caso, obteve resultados bem ajustados aos dados experimentais.

Quanto aos perfis de temperatura da gota (Figura 6-3b) e de velocidade do gás (Figura 6-3c), o modelo CFD foi capaz de reproduzir o comportamento característico conforme reportado na literatura para ambos os perfis (CALAY e HOLDO, 2008; COLDRICK, 2016; BARROS et al., 2019; ANJOS, 2021). No caso da Figura 6-3b, a queda de temperatura esperada para as gotículas líquida de butano reflete o *flashing* juntamente com a ação do *entrainment* do ar. A região bifásica possuiu um alcance de 6.157m conforme descrito na Tabela 6.1, e que pode ser visualizado pelo gráfico de temperatura da gota versus o alcance X (Figura 6-3b).

Uma vez que não houve a queda esperada de temperatura conforme visualizado no perfil de temperatura do gás, a quantidade de líquido ainda disperso no ar é maior do que o esperado, contribuindo assim para um alcance maior das gotículas líquida do que a obtida no trabalho de Anjos (2021).

No que diz respeito ao perfil de velocidade do gás, este também se apresentou coerente com o esperado pela literatura onde o momento do jato segue em queda devido ao arrasto, à turbulência da própria nuvem e ao *entrainment* do ar até atingir a velocidade do vento.

Na Tabela 6.1 é possível visualizar os valores de extensão e volume que a nuvem de gás alcançou na dispersão do presente caso, nas concentrações de interesse.

Tabela 6.1 - Extensão e volume da nuvem de gás butano formada no Caso 2.

Caso 2	Concentração	CFD	Anjos (2021)	Effects	Quadvent
Extensão (m)	LEL	10.112	10.38	12.2	14.034
	½ LEL	19.074	19.5	20.5	28.325
	¼ LEL	44.204	38.00	34.00	-
Volume (m ³)	LEL	5.50	27.321	-	36.854
	½ LEL	37.017	174.282	-	287.909
	¼ LEL	220.028	7514.65	-	-
Alcance da gota (m)	-	6.157	2.5	-	-

O resultado experimental apontado para a extensão no LEL foi de 10.38m, e o resultado obtido pelas simulações em CFD do presente trabalho se aproximou do experimental. Resultado semelhante foi verificado no trabalho de Anjos (2021), em seguida um aumento gradativo nos valores obtidos pelo Effects seguido do Quadvent 2. Para a concentração em $\frac{1}{2}$ LEL os resultados de extensão foram próximos, enquanto que para o volume da nuvem tanto em $\frac{1}{2}$ como em $\frac{1}{4}$ do LEL os valores em CFD foram menores do que os observados por Anjos (2021) e pelo Quadvent 2, não sendo possível validar com o experimental dada a ausência deste resultado na literatura.

A disparidade observada nos valores está relacionada a forma como cada modelo obtém o volume para a concentração desejada. Vale atentar para o fato de o volume de uma nuvem de gás está diretamente ligado à taxa de fluxo mássico, à ventilação do ambiente e a presença ou não de obstáculos ou o contato com o solo. Neste sentido, observando o Quadvent 2, trata-se de um modelo matemático desenvolvido com o intuito de estimar o volume hipotético de uma nuvem de gás inflamável (V_z) e a extensão da nuvem a fim de auxiliar na classificação de área tanto para locais fechados como aberto, ambos ventilados, porém com a restrição de a velocidade do vento não poder ser alterada para locais abertos, além de não ser possível definir a altura que o ponto de emissão se encontra. Assim como Anjos (2021), o Quadvent segue a resolução de modelos integrais para jato de gás, o que aponta para a aproximação entre os resultados de Anjos (2021) e do Effects. Para o cálculo do volume, Anjos (2021) leva em consideração o cálculo de tronco de cone nos casos de jato elevado, e tronco de pirâmide para o jato no nível do solo.

Quanto ao CFD, este gera os resultados de volume baseado na resolução das equações de conservação, como mencionado anteriormente, juntamente com os modelos matemáticos selecionados para reproduzir o cenário de liberação desejada. A aplicação do método de discretização para uma resolução aproximada das equações diferenciais é feita em CFD, logo a qualidade da discretização aplicada ditará a precisão dos resultados, como pode ser verificado na análise de dependência de malha.

6.2 ANÁLISE DAS LIBERAÇÕES BIFÁSICAS – CONDIÇÕES DE EQUILÍBRIO E DE NÃO-EQUILÍBRIO

Na Tabela 6.2 estão contidos os resultados de extensão e volume de pluma avaliados nas concentrações do LEL, $\frac{1}{2}$ LEL e $\frac{1}{4}$ LEL para ambas as condições de liberação dos casos descritos na Tabela 5.4.

Partindo da Tabela 5.4, é necessário analisar as diferenças relacionadas aos parâmetros de entrada do CFD que são característicos de cada condição no orifício de liberação. Inicialmente nota-se que os casos na condição de não-equilíbrio possuem fluxo mássico e fração de líquido maior que a condição de equilíbrio. Tal característica implicará em extensão e volume de pluma maiores mediante uma condição de não-equilíbrio do que na condição de equilíbrio, conforme é observado na Tabela 6.2.

Tabela 6.2 - Valores de extensão e volume da nuvem de gás referente aos casos da Tabela 5.4.

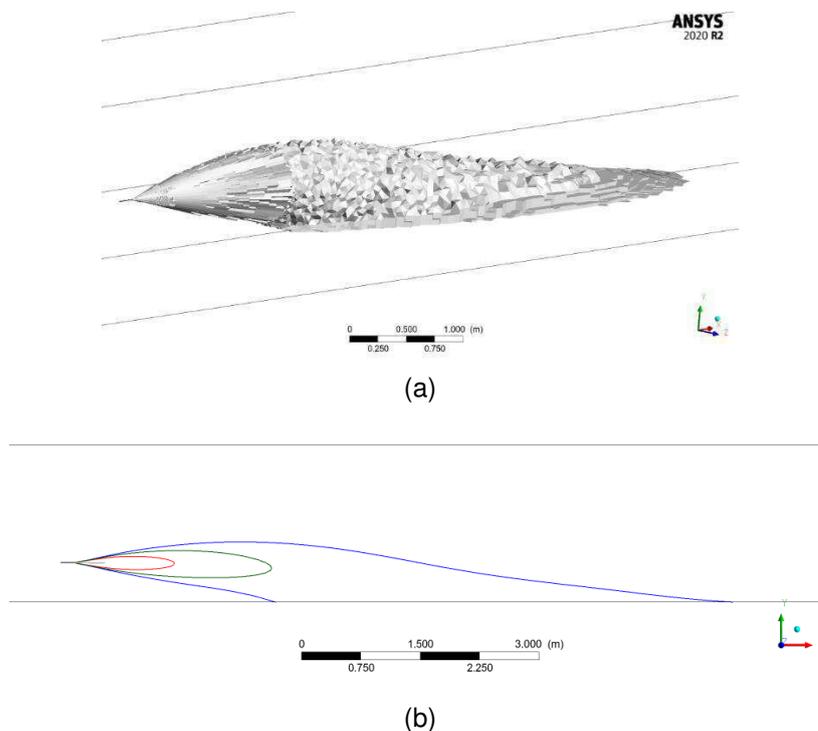
Caso		1	2	3	4
Equilíbrio homogêneo					
Extensão (m)	LEL	1.292	1.288	2.430	1.257
	$\frac{1}{2}$ LEL	2.508	2.523	7.852	2.514
	$\frac{1}{4}$ LEL	8.017	7.759	15.836	5.258
Volume (m ³)	LEL	0.017	0.016	0.113	0.013
	$\frac{1}{2}$ LEL	0.133	0.134	1.558	0.087
	$\frac{1}{4}$ LEL	1.714	1.761	12.593	0.499
Não-equilíbrio					
Extensão (m)	LEL	3.610	4.725	11.711	3.713
	$\frac{1}{2}$ LEL	11.590	10.914	21.167	13.112
	$\frac{1}{4}$ LEL	20.843	19.311	34.583	25.398
Volume (m ³)	LEL	0.36	0.438	4.763	0.230
	$\frac{1}{2}$ LEL	4.898	4.891	33.785	2.230
	$\frac{1}{4}$ LEL	33.642	33.832	201.181	15.490

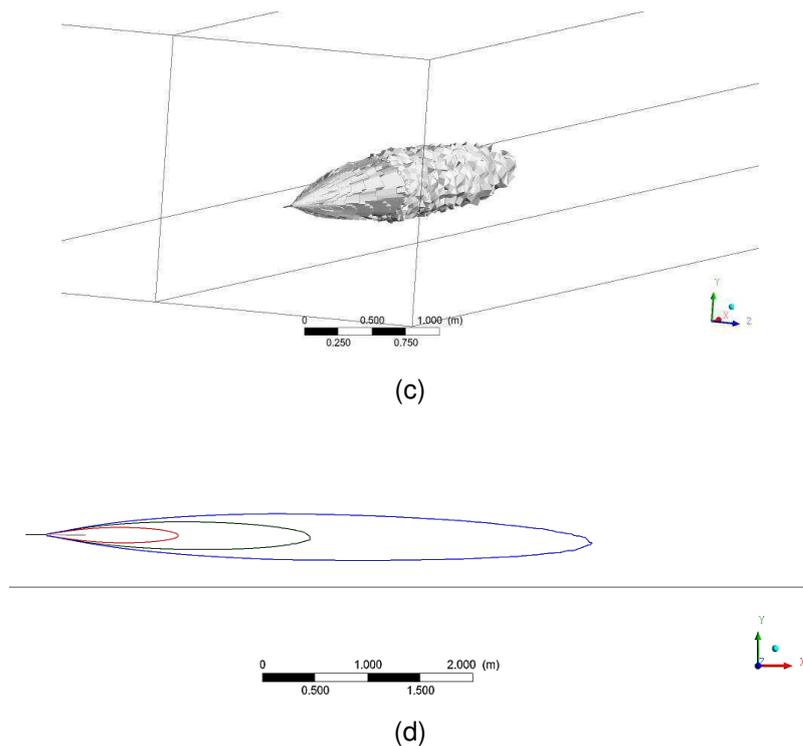
Além da condição de liberação, a nuvem de gás propano é mais densa que o ar, caracterizando-a como uma nuvem de flutuabilidade negativa. Conforme descreve Pontiggia et al. (2009), gases de flutuabilidade negativa tem o perigo

maximizado devido a distância e duração que a nuvem possui ao atingir o solo, pois tem o efeito de diluição reduzido.

No caso da pluma formada pela liberação em equilíbrio observado pelo Caso 4 (Tabela 5.4 e Tabela 6.2) e ilustrado na Figura 6-4c, as forças de momento predominantes ressaltadas pela velocidade do vento favorece o *entrainment* de ar ao redor da pluma, contribuindo com um formato bem definido da pluma e com o aumento da diluição da mesma. Desta forma os valores de extensão e volume tendem a ser menores do que quando desconsiderada a velocidade do vento conforme visto no Caso 2 (Tabela 5.4 e Tabela 6.2) e ilustrado na Figura 6-4a. Nesta figura a ausência da influência do efeito do vento sob a pluma contribuiu para a sua queda devido à diferença de densidade, e ausência do momento empregado pela velocidade do vento reduzindo a influência das condições atmosféricas sob a pluma. Ao atingir o solo, a pluma espalha-se, eliminando a presença de *entrainment* do próprio jato na região em contato com o solo, logo reduzindo o efeito de diluição.

Figura 6-4 – Resultados das plumas na condição de equilíbrio para os Casos 2 e 4, respectivamente: (a) e (c) volume da pluma em $\frac{1}{4}$ LEL, e (b) e (d) contornos da pluma para cada concentração de interesse (LEL, $\frac{1}{2}$ LEL e $\frac{1}{4}$ LEL) avaliados no plano de simetria.





O efeito do solo e espalhamento da pluma foi mais frequentemente observado para a condição de não-equilíbrio, uma vez que a presença da fase líquida nesta condição é maior, desta forma propiciando o aumento da densidade efetiva da pluma e, unido efeito do solo, resulta na formação de plumas extensas e volumosas. Na Figura 6-5, estão ilustrados os Casos 2 e 4 para a condição de não-equilíbrio, contendo também os contornos da pluma em cada concentração de interesse. A ação da velocidade do vento (Figura 6-5c) resultou no estreitamento da pluma, e gerou pontas característica de um espalhamento mais acentuado no plano xz devido ao vento *coflow* (cofluxo). Tal formato e espalhamento característico observado pode ser melhor observado na Figura 6-6b.

Hourri, Angers e Bénard (2009), ao estudarem o efeito de superfícies nas extensões das liberações de hidrogênio e metano, observaram que para uma liberação posicionada a 0.5m do solo verificou-se um aumento na extensão de quase 200% no caso do metano e de 42% para o hidrogênio devido ao efeito do solo quando comparado com as extensões dos jatos livres, avaliadas no LEL.

Figura 6-5 - Casos 2 (a e b) e 4 (c e d) na condição de não-equilíbrio, respectivamente: (a) e (c) volume da pluma em $\frac{1}{4}$ LEL, e (b) e (d) contornos da pluma para cada concentração de interesse (LEL, $\frac{1}{2}$ LEL e $\frac{1}{4}$ LEL) avaliados no plano de simetria.

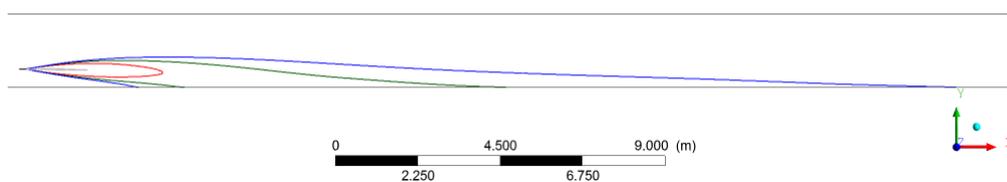
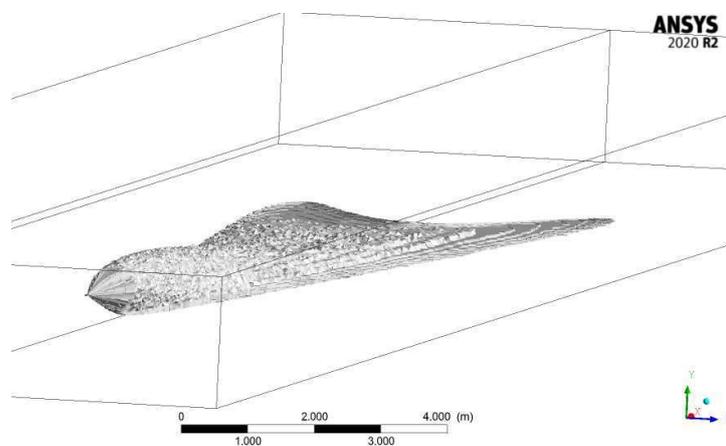
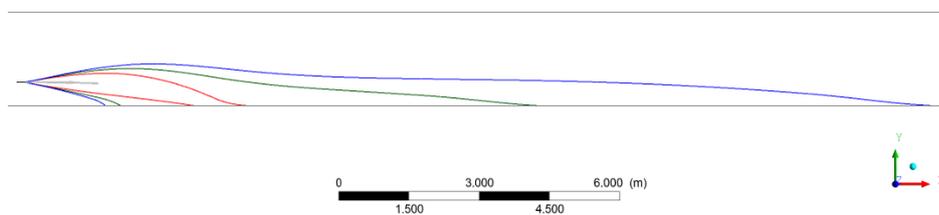
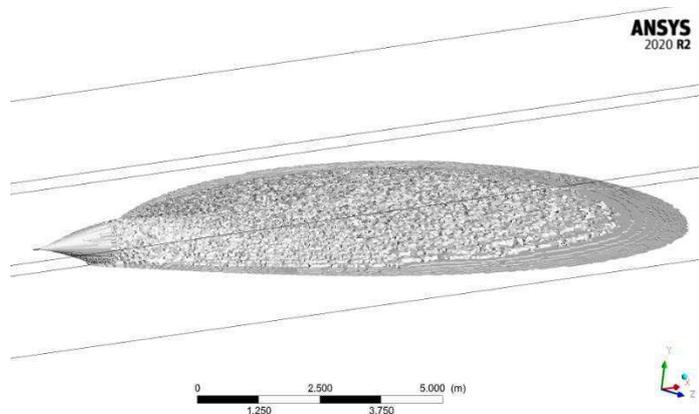
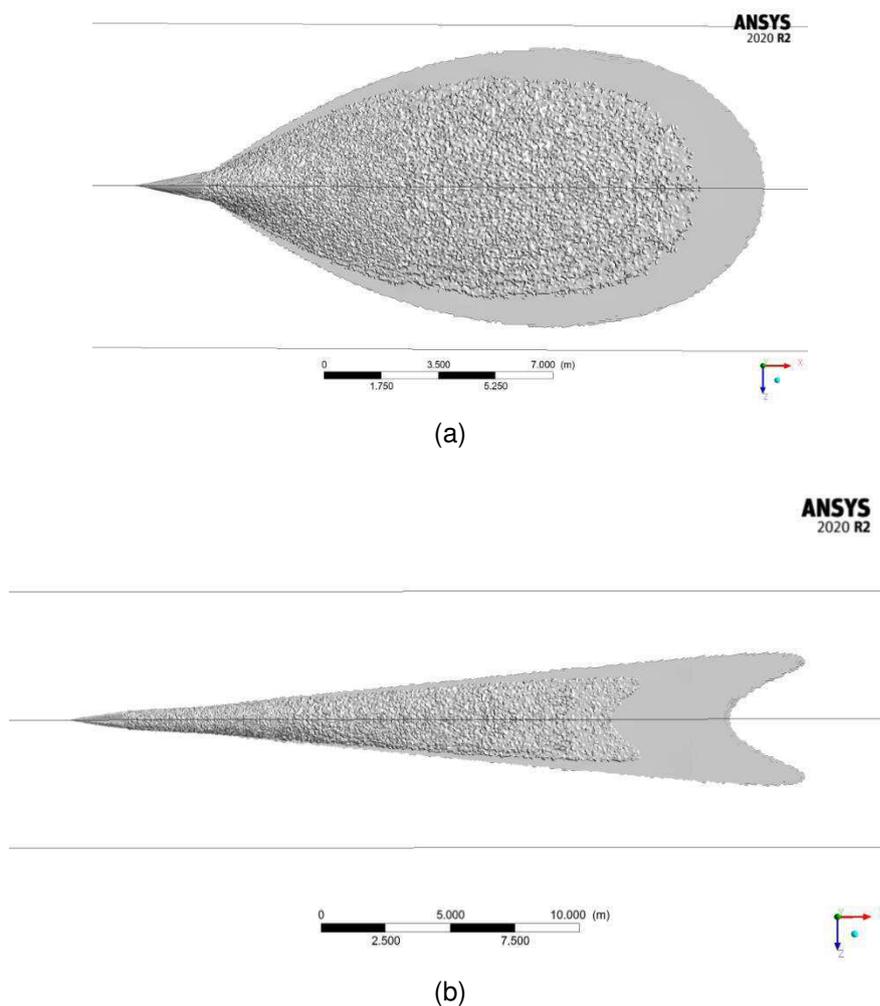


Figura 6-6 - Vista superior dos volumes das plumas em $\frac{1}{4}$ LEL nos casos (a) 2 e (b) 4, respectivamente, na condição de não-equilíbrio.



Salazar (2016) relatando sobre o estudo realizado por Van Ulden em 1974, aponta que a dispersão lateral de um gás denso corresponde a aproximadamente quatro vezes o tamanho da dispersão lateral de um gás neutro, e a dispersão vertical é aproximadamente quatro vezes menor que a de um gás neutro. Tal comportamento também é corroborado pelo trabalho de Hanna e Britter (1996), reforçando o perfil de pluma observado mediante a liberação, dispersão e espalhamento da nuvem de propano obtidos (Figura 6-4 e Figura 6-5).

6.3 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE – CONDIÇÕES DE EQUILÍBRIO TERMODINÂMICO E DE NÃO-EQUILÍBRIO

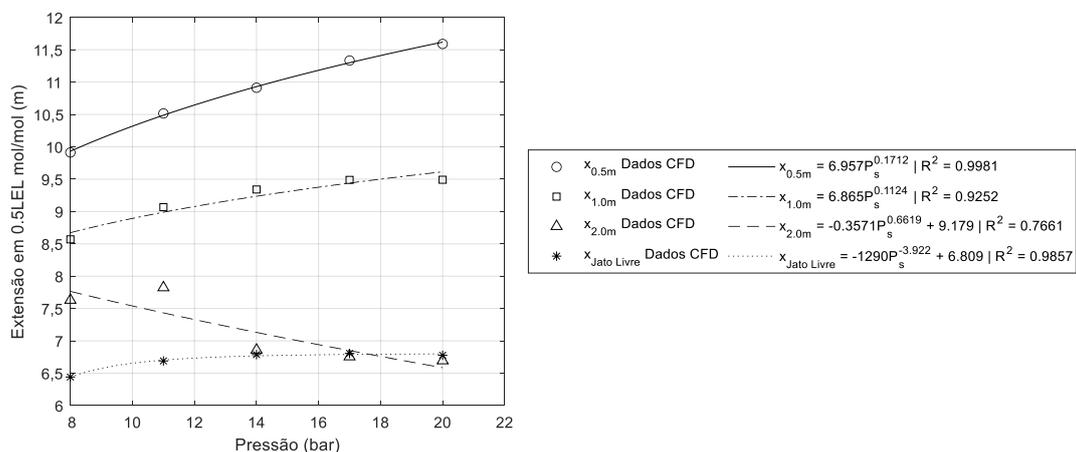
Os resultados obtidos através das simulações realizadas para os casos da análise de sensibilidade encontram-se em ANEXO e serão tratados a seguir.

6.3.1 Análise de sensibilidade: condição de não-equilíbrio

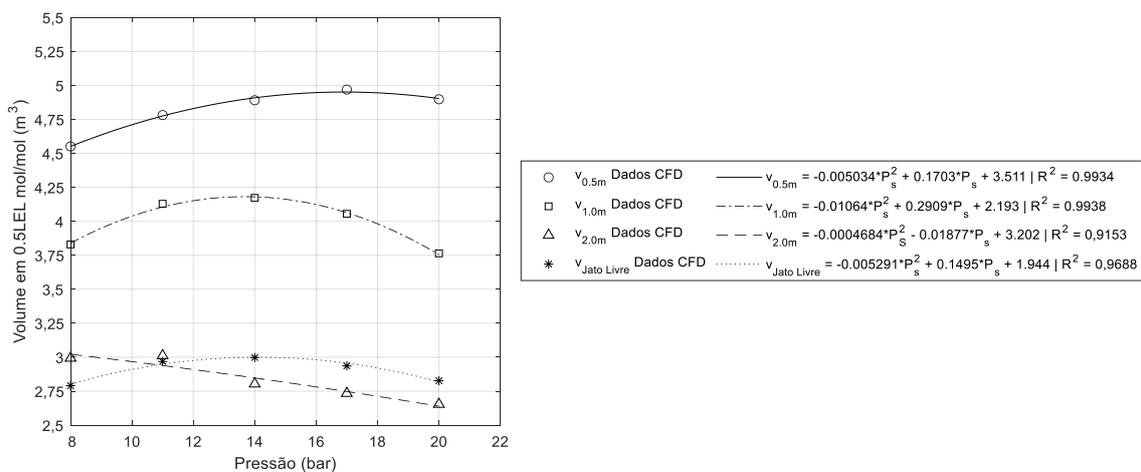
Os resultados obtidos para a condição de não-equilíbrio no orifício de liberação encontram-se dispostos de acordo com o parâmetro selecionado para a sensibilidade. Desta forma, em ANEXO, as Tabela I.12 e Tabela I.13 correspondem aos resultados de extensão e volume, respectivamente, para a análise da pressão de armazenamento, as Tabela I.15 e Tabela I.16 para a análise do diâmetro do orifício de liberação, as Tabela I.18 e Tabela I.19 para a análise da velocidade do vento, e a Tabela I.20 para a análise da altura da fonte de liberação. Os conjuntos de casos referentes aos três primeiros parâmetros de análise, foram simulados nas três alturas mencionadas (0.5, 1.0 e 2.0 m) e na condição de jato livre. Os resultados disponíveis em ANEXO foram coletados nas concentrações de interesse (LEL, $\frac{1}{2}$ LEL e $\frac{1}{4}$ LEL).

A partir dos resultados avaliados em $\frac{1}{2}$ LEL foram gerados modelos de regressão que permitiram identificar o perfil de comportamento da pluma mediante a variação dos parâmetros em estudo. Na Figura 6-7 estão ilustrados os perfis e modelos obtidos para extensão e volume de pluma versus o parâmetro de análise. Cada curva corresponde a uma altura simulada, ou jato livre.

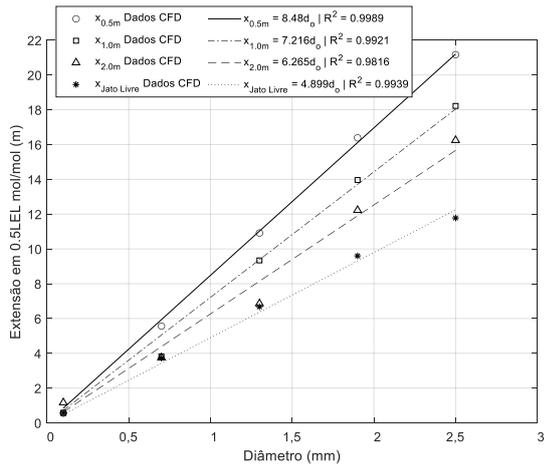
Figura 6-7 – Perfis dos modelos de regressão para a extensão e o volume da pluma versus o parâmetro da análise de sensibilidade (condição de não-equilíbrio), sendo, respectivamente: (a) e (b) pressão, (c) e (d) diâmetro do orifício de liberação, (e) e (f) velocidade do vento, (g) e (h) altura da fonte de liberação ao solo, (i) e (j) concentração da nuvem em mol/mol.



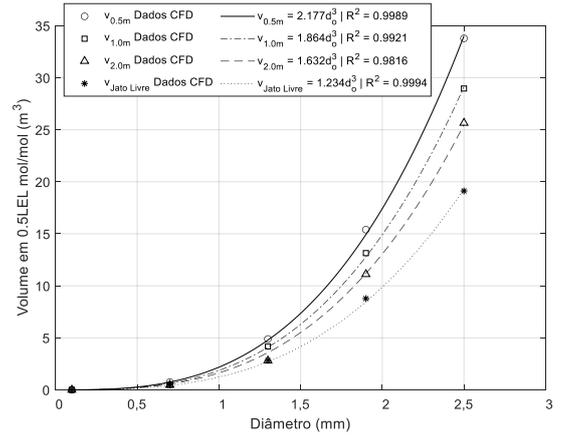
(a)



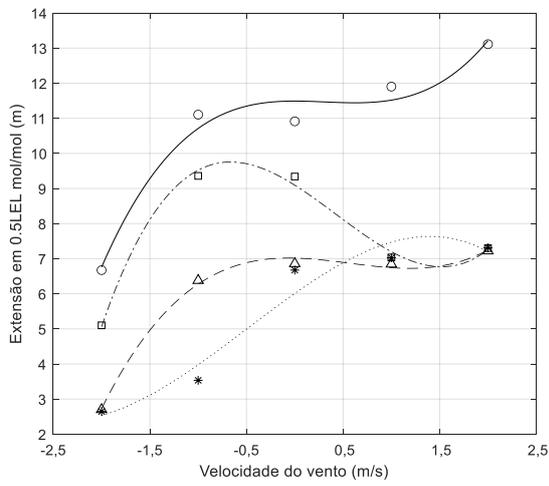
(b)



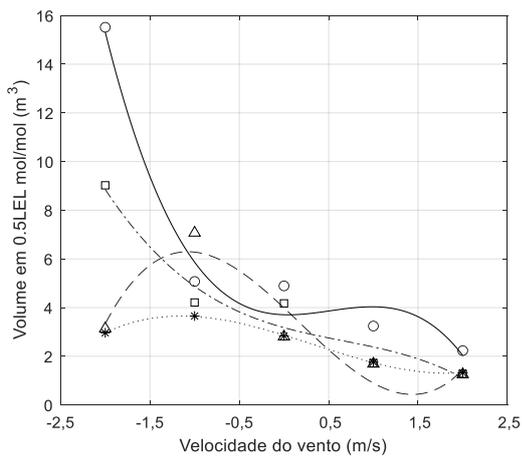
(c)



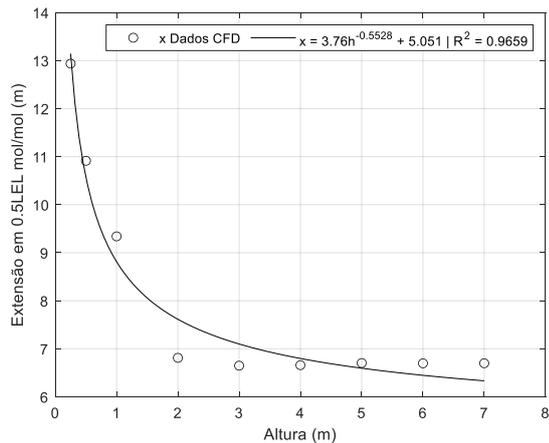
(d)



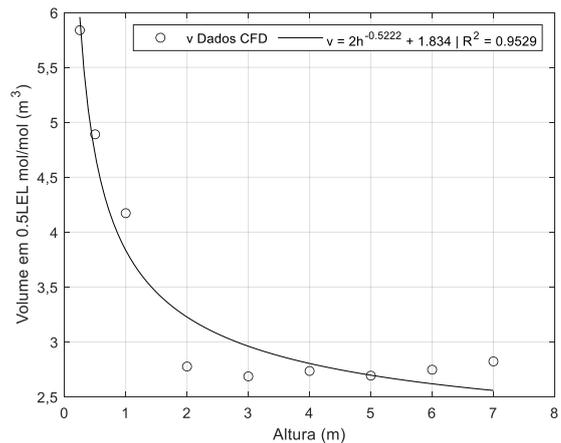
(e)



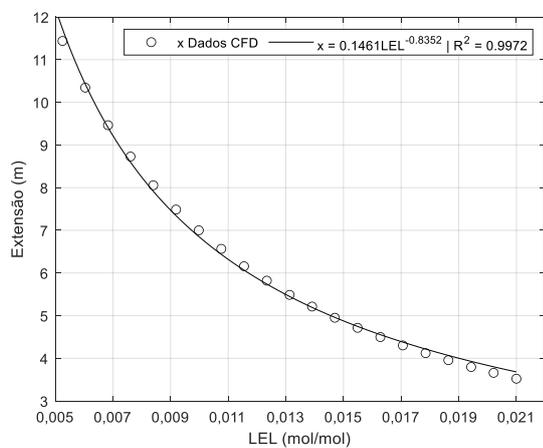
(f)



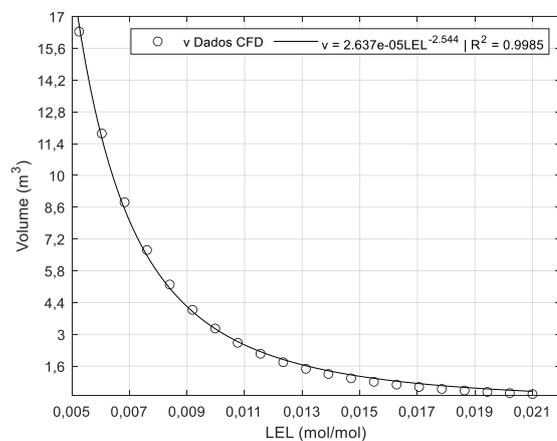
(g)



(h)



(i)



(j)

Com base na Figura 6-7 nota-se que a extensão aumenta com o aumento da pressão, do diâmetro de orifício, da velocidade do vento no mesmo sentido da liberação (*coflow*) e, também, com o aumento da velocidade no sentido oposto a liberação (*counterflow*) até -1.0 m/s. Este comportamento também foi observado para a liberação de jatos de gás descrito no trabalho de Nascimento et al. (2021) ao determinar um modelo empírico para o cálculo da extensão da área perigosa, e no trabalho de Barros et al. (2020) ao avaliar o efeito da velocidade do vento em uma nuvem de gás inflamável. Segundo descreve Barros et al. (2020), o aumento observado na extensão em função da velocidade do vento ocorre devido à entrada de ar na nuvem que empurra a nuvem de gás para frente aumentando a extensão.

Observou-se, também, que a extensão da nuvem é inversamente proporcional à altura e a concentração, ou seja, a extensão aumenta quando a altura diminui (Figura 6-7g), e quando a concentração diminui (Figura 6-7i).

Com relação ao volume, este aumenta à medida que o diâmetro do orifício aumenta, como também com o aumento da velocidade do vento no sentido oposto à liberação, e para o intervalo de pressão de 8 a 14 bar. E assim como a extensão, o volume aumenta com a diminuição da altura da fonte e da concentração da pluma. O aumento da velocidade do vento no sentido da liberação levou à diminuição do volume da pluma devido ao efeito de diluição, que é maior para maiores velocidades do vento no sentido da liberação.

Verifica-se que a pressão de armazenamento se trata do parâmetro de menor influência na extensão e no volume. Isso pode ser observado pelos intervalos de variação dos resultados para cada conjunto dos parâmetros de análise. Nos casos em que a liberação ocorreu a 0.5 m do solo, a variação observada entre os intervalos dos eixos para avaliação da pressão foi de aproximadamente 0.98 m e 0.32 m³, para a extensão e volume respectivamente. Enquanto isso, nos outros parâmetros este intervalo de variação foi consideravelmente maior, a exemplo do diâmetro de orifício e da velocidade do vento, os intervalos de variação foram em média, respectivamente, 17.77 m e 29.47 m³ para o diâmetro de orifício, e 4.42 m e 7.29m³ para a velocidade do vento.

Ainda observando os perfis de variação da pressão, nota-se que na curva referente a 2 m no intervalo de 8 a 11 bar há uma diferença de comportamento quando comparado às outras alturas simuladas. Neste intervalo a 2 m observou-se que a pluma atinge o solo, logo havendo o efeito do solo na extensão e volume da pluma somente nesses casos à 2 m, enquanto que nas outras alturas todos os casos resultaram no contanto da pluma com o solo. Pode-se dizer então, que o comportamento no perfil a 2 m apresenta dois cenários de dispersão, um em que a pluma segue no solo e o outro que a pluma se mantém no ar.

Agora, percebe-se que logo após 11 bar os volumes de pluma a 2 m são menores do que para os casos na condição de jato livre. Este comportamento se dá pela presença de turbulência gerada entre o a pluma e o solo ao passo

que a pluma se desenvolve. Isso implica em uma diluição maior do que na condição de jato livre, que na ausência do solo não se desenvolve tal zona de turbulência.

O efeito do solo foi também verificado nos demais parâmetros da análise. Nos casos referentes à influência velocidade do vento (Figura 6-7e-f), observou-se que a pluma atinge o solo em todos os casos simulados para a altura de 0.5 m do solo, já para a fonte a 1 m do solo foi visto o mesmo comportamento no intervalo de velocidade do vento de -2 a 0 m/s, e a 2 m o efeito do solo foi visualizado apenas em -1 m/s.

Neste sentido, nota-se que a tendência observada em que todos os casos que atingem o solo a 0.5 m é de aumento da extensão à medida que o vento *coflow* aumenta, e a diminuição da extensão com o aumento do vento *couterflow*. Já para os casos a 1 m, há uma quebra no comportamento do perfil de extensão exatamente após a velocidade de vento nula, apontando para uma pluma de flutuabilidade negativa que mantém sua dispersão na atmosfera, sem contato com o solo.

No que tange aos perfis de variação da altura (Figura 6-7 g-h), é observado o efeito do solo para valores de alturas menores que 2 m. Alturas acima de 2 m resultaram em extensões e volumes de pluma aproximadamente iguais. Retomando aos estudos realizados por Hourri, Angers e Bénard (2009), que apontaram um aumento na extensão de 200% para a nuvem de metano, e de 42% para a nuvem de hidrogênio quando comparados com as extensões de jato livre, para uma fonte de liberação a 0.5 m de altura do solo, a uma concentração no LEL. No presente estudo foi possível visualizar diferenças consideráveis nas extensões e volumes da pluma quando avaliada a influência do solo e comparada com as simulações de jato livre. A falta de *entrainment* de ar na região da pluma em contato com o solo, unido a uma pressão de sucção gerada por uma baixa pressão que se desenvolve na superfície da nuvem próxima ao solo e a alta pressão na superfície mais externa da nuvem, faz com que a nuvem se adira ao solo, resultando em extensões maiores quando comparado com os casos que não ocorre o contato com o solo (BÉRNARD et al. 2016).

Na Tabela 6.3 estão as diferenças entre os resultados de extensão e volume nas alturas avaliadas (Tabela I.20) em comparação à condição de jato livre. As diferenças foram gradativamente maiores para concentrações gradativamente menores. Verifica-se que para a altura de 0.25 m a extensão da pluma foi 99.8% maior que a pluma na condição de jato livre, avaliando $\frac{1}{4}$ LEL, já para $\frac{1}{2}$ LEL e LEL a diferença foi de 93.8% e 91.81% maior do que a condição de jato livre. Com relação ao volume, o efeito do solo resultou em um aumento do volume de pluma de até 167.73% em $\frac{1}{4}$ LEL e 103.49% no LEL, quando comparados com a pluma de jato livre.

Tabela 6.3 – Efeito do solo visualizado pela diferença entre as extensões e volumes dos casos variando altura frente a condição de jato livre.

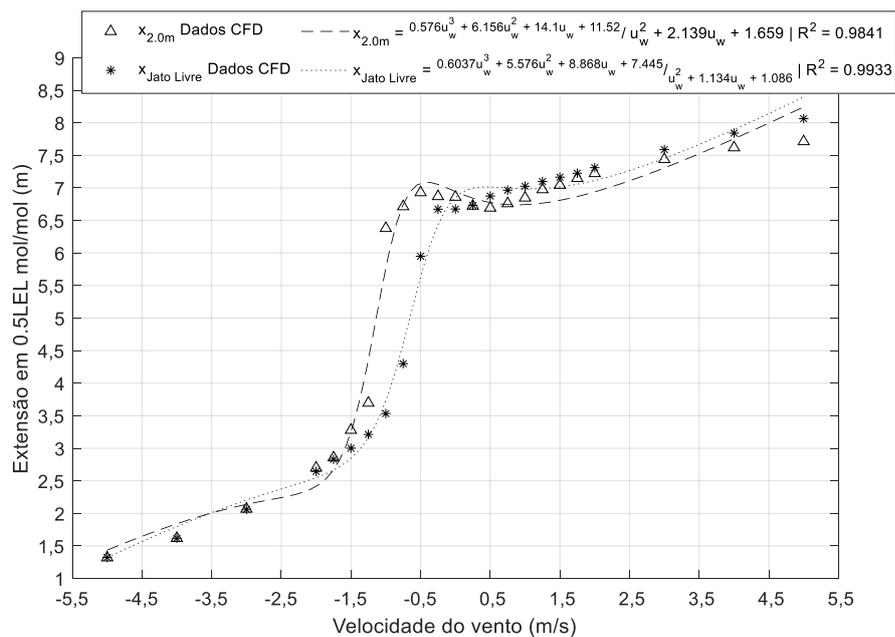
Altura da fonte (m)	Extensão			Volume		
	LEL	$\frac{1}{2}$ LEL	$\frac{1}{4}$ LEL	LEL	$\frac{1}{2}$ LEL	$\frac{1}{4}$ LEL
0.25	91.81%	93.80%	99.80%	103.49%	106.06%	167.73%
0.5	33.81%	63.50%	71.12%	19.48%	72.59%	109.68%
1	0.32%	39.93%	52.56%	0.15%	47.25%	76.62%
2	0.30%	2.04%	32.33%	1.29%	2.04%	41.99%
3	0.02%	0.40%	21.38%	2.07%	5.20%	24.15%
4	0.12%	0.24%	17.82%	1.08%	3.46%	17.03%
5	0.01%	0.42%	17.67%	2.25%	4.97%	9.49%
6	0.40%	0.33%	10.32%	0.56%	3.06%	0.08%
7	0.23%	0.36%	1.48%	0.37%	0.40%	1.26%

As maiores diferenças observadas no LEL seguem até 0.5 m, enquanto que para $\frac{1}{2}$ LEL segue até 1 m, e para $\frac{1}{4}$ LEL segue até 6 m. Tais intervalos corresponde aos casos onde observou-se a pluma no solo, e após eles as diferenças são desprezíveis. Para alturas maiores que 1 m, ainda é possível visualizar valores de volumes de pluma em $\frac{1}{2}$ LEL menores do que na condição de jato livre, o que está relacionado a um efeito indireto do solo com a superfície inferior da pluma em virtude do *entrainment* gerado pelo jato ao redor da pluma que aumenta a turbulência no espaço entre a pluma e o solo.

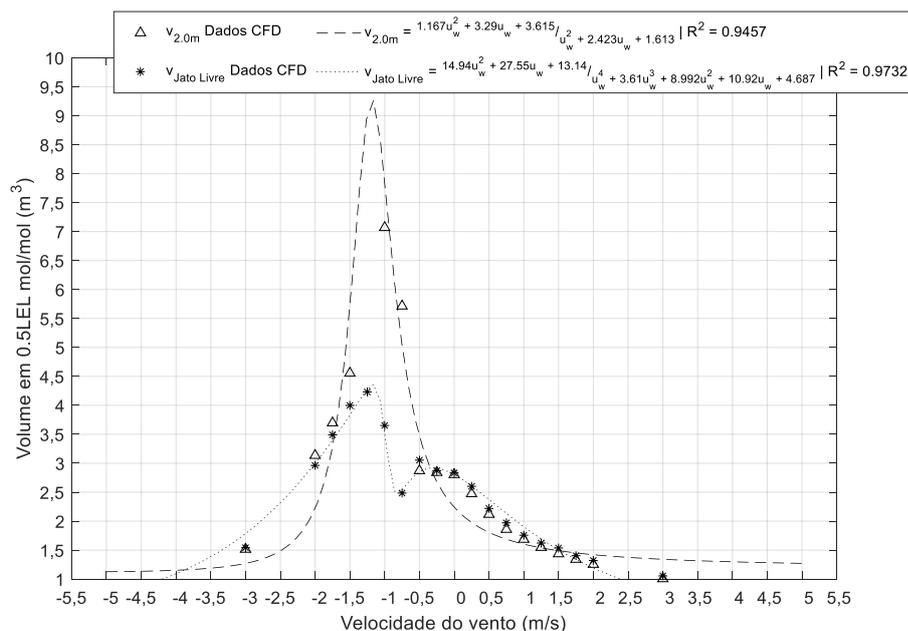
Em vista da influência da velocidade do vento num cenário de liberação, esta, conseqüentemente, influencia consideravelmente no estudo de classificação de áreas. Devido a necessidade de aprofundar a análise a cerca

deste parâmetro, o intervalo de análise da u_w foi ampliado para a melhor compreensão dos perfis extensão e volume de pluma, vide Tabela I. 22 em ANEXO. As simulações se desenvolveram para a altura de 2 m e a condição de jato livre. Os perfis obtidos encontram-se ilustrados na Figura 6-8

Figura 6-8 - Perfil da extensão e do volume da pluma de propano frente a influência da velocidade do vento para um maior número de pontos simulados – fonte a 2.0 m e condição de jato livre.



(a)



(b)

Com mais dados para análise do perfil de velocidade (Figura 6-8), é possível notar um comportamento melhor definido do que o observado na Figura 6-7e-f. Uma análise mais aprofundada do efeito da velocidade do vento na extensão e volume de pluma será detalhada no subtópico 6.4.

No mais, a partir de um maior número de pontos simulados, foi possível definir melhor os perfis, tornando clara determinadas tendências da pluma que não ficaram claras anteriormente. Pode-se destacar, no perfil da extensão, a tendência progressiva de diminuição da extensão da pluma para ventos *couterflow* maiores que 2 m/s, e uma tendência *coflow* para o jato livre após 2 m/s de aumento da extensão, diferente do que foi observado no perfil anterior com menos pontos e range reduzido. Quanto ao volume, notou-se que não houve um perfil uniforme quanto ao jato livre, havendo uma diminuição no valor do volume em -0.75 m/s, o que está atrelado à inversão da pluma neste ponto, que será melhor discutido em seguida.

Os modelos obtidos ao longo da análise de sensibilidade para uma liberação na condição de não-equilíbrio encontram-se descritos na Tabela 6.4.

Tabela 6.4 - Equações obtidas pela análise de sensibilidade avaliada na concentração de 0.5LEL.

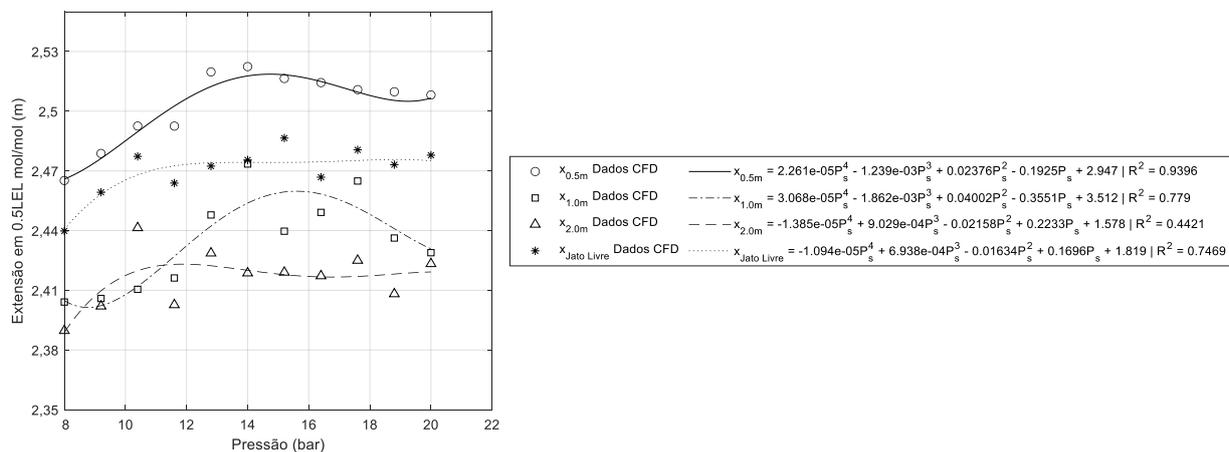
Variável	Altura (m) ou Jato Livre (JL)	Extensão (m)	Volume (m³)
Pressão (bar)	0.5	$x(P_s) = 6.957P_s^{0.1712}$	$V(P_s) = -0.005034P_s^2 + 0.1703P_s + 3.511$
	1.0	$x(P_s) = 6.865P_s^{0.1124}$	$V(P_s) = -0.01064P_s^2 + 0.2909P_s + 2.193$
	2.0	$x(P_s) = -0.371P_s^{0.6619} + 9.179$	$V(P_s) = -0.0004684P_s^2 - 0.01877P_s + 3.202$
	JL	$x(P_s) = -1290P_s^{-3.922} + 6.809$	$V(P_s) = -0.005291P_s^2 + 0.1495P_s + 1.944$
Diâmetro (mm)	0.5	$x(d_o) = 8.48d_o$	$V(d_o) = 2.177d_o^3$
	1.0	$x(d_o) = 7.216d_o$	$V(d_o) = 1.864d_o^3$
	2.0	$x(d_o) = 6.265d_o$	$V(d_o) = 1.632d_o^3$
	JL	$x(d_o) = 4.899d_o$	$V(d_o) = 1.234d_o^3$
Velocidade do vento (m/s)	2.0	$x(u_w) = \frac{0.576u_w^3 + 6.156u_w^2 + 14.1u_w + 11.52}{u_w^2 + 2.139u_w + 1.659}$	$V(u_w) = \frac{1.167u_w^2 + 3.29u_w + 3.615}{u_w^2 + 2.423u_w + 1.613}$
	JL	$x(u_w) = \frac{0.6037u_w^3 + 5.576u_w^2 + 8.868u_w + 7.445}{u_w^2 + 1.134u_w + 1.086}$	$V(u_w) = \frac{14.94u_w^2 + 27.55u_w + 13.14}{u_w^4 + 3.61u_w^3 + 8.992u_w^2 + 10.92u_w + 4.687}$
Altura (m)	-	$x(h) = 3.76h^{-0.5528} + 5.051$	$V(h) = 2h^{-0.5222} + 1.834$
Fator k	JL	$x(LEL) = 0.1461LEL^{-0.8352}$	$V(LEL) = 2.63 \times 10^{-5}LEL^{-2.545}$

6.3.2 Análise de sensibilidade: condição equilíbrio termodinâmico

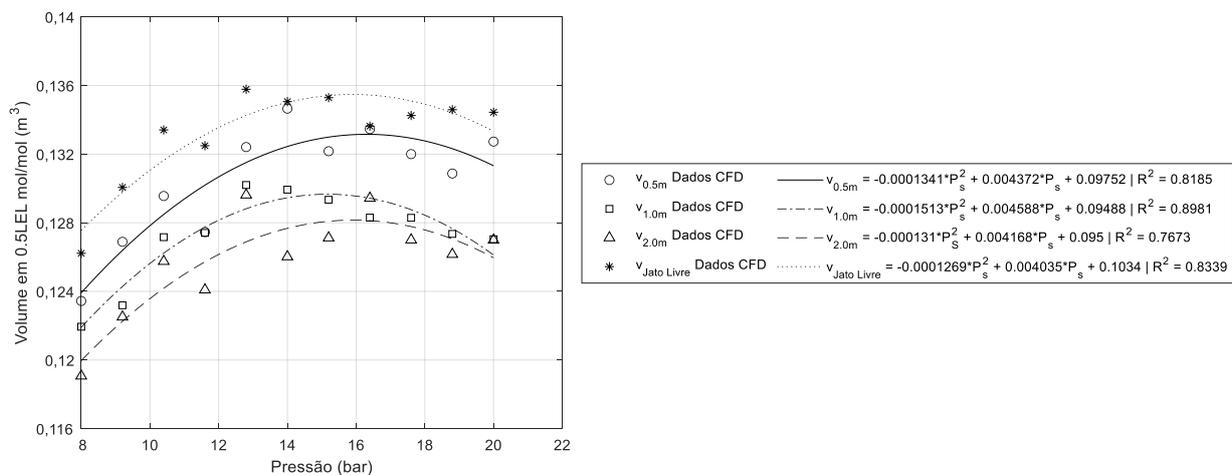
Semelhantemente ao observado no caso anterior, condição de não-equilíbrio, os resultados obtidos para a condição de equilíbrio termodinâmico no orifício de liberação encontram-se em ANEXO. As Tabela I. 2 e Tabela I. 3 correspondem aos resultados de extensão e volume, respectivamente, para a análise da pressão de armazenamento, as Tabela I. 5 e Tabela I. 6 para a análise do diâmetro do orifício de liberação, as Tabela I. 8 e Tabela I. 9 para a análise da velocidade do vento, e a Tabela I.10 para a análise da altura da fonte de liberação.

Na Figura 6-9 estão ilustrados os perfis e modelos obtidos para extensão e volume de pluma versus o parâmetro de análise, conforme os modelos de regressão gerados a partir dos dados em 1/2 LEL.

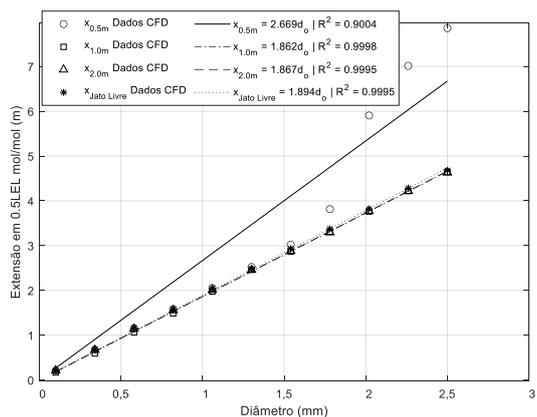
Figura 6-9 – Perfis dos modelos de regressão para a extensão e o volume da pluma versus o parâmetro da análise de sensibilidade (condição de equilíbrio), sendo, respectivamente: (a) e (b) pressão, (c) e (d) diâmetro do orifício de liberação, (e) e (f) velocidade do vento, (g) e (h) altura da fonte de liberação ao solo, (i) e (j) concentração da nuvem em mol/mol.



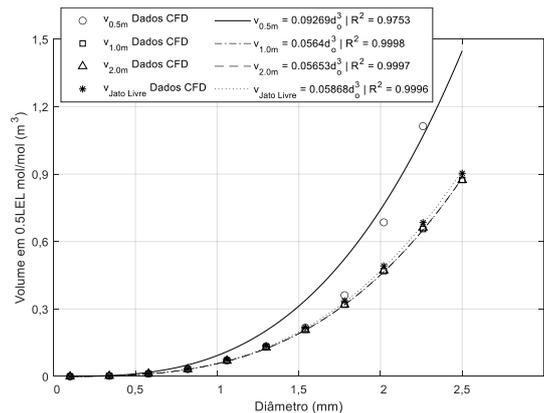
(a)



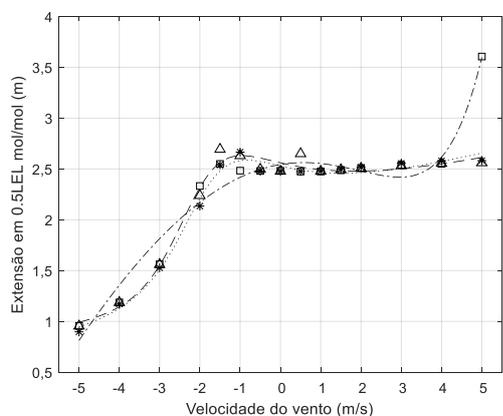
(b)



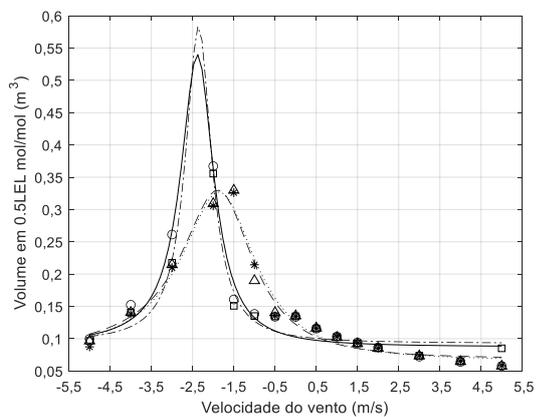
(c)



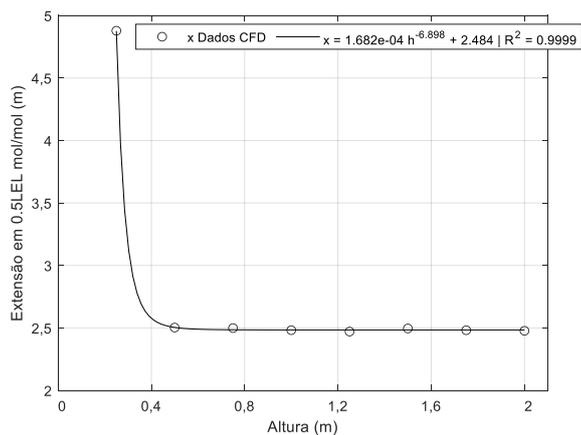
(d)



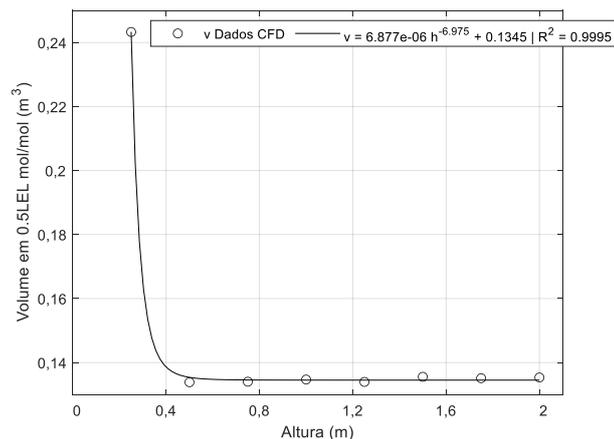
(e)



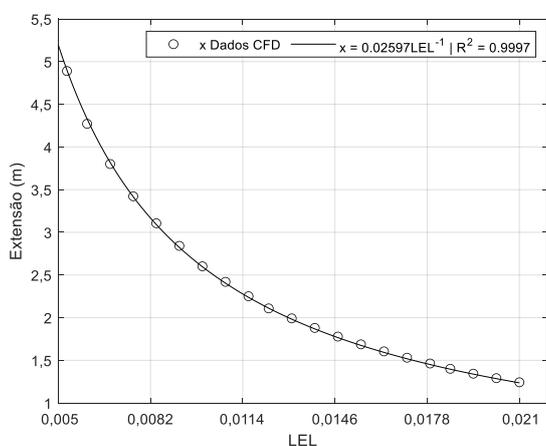
(f)



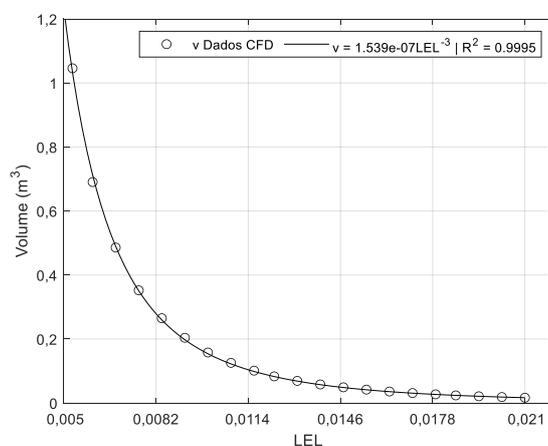
(g)



(h)



(i)



(j)

Com base na Figura 6-9 nota-se um comportamento semelhante ao observado nos casos anteriores na condição de não-equilíbrio. Ou seja, há o aumento da extensão perigosa a medida que aumenta a pressão de armazenamento, o diâmetro do orifício, e a velocidade do vento *coflow*, e *counterflow* para o intervalo de velocidade de 0 a -1.5 m/s. Já a diminuição da extensão perigosa foi observada com o aumento da velocidade do vento *counterflow* a partir de -1.5 até -5 m/s, como também com o aumento da altura da fonte de liberação e da concentração de análise.

Neste caso, as condições de liberação resultam em plumas menores nas concentrações de análise do que o observado na condição anterior. O equilíbrio termodinâmico considerado no orifício de liberação confere uma quantidade reduzida da fase líquida disponível para evaporação, e conseqüentemente para

alimentar a pluma. Na maioria dos casos a pluma apresentou um formato bem definido, sofrendo uma influência maior do momento do jato do que do empuxo ou da turbulência gerada entre a pluma e o solo, o que pode ser percebido pelas altas velocidades do fluxo, quando comparado com o caso anterior.

Ainda assim, frente a diâmetros de orifício maiores que implica no aumento do fluxo mássico, a pluma cai e atinge o solo. Esse comportamento foi observado para o jato de liberação à 1 m a partir do diâmetro de 1.78 mm em diante quando observada a concentração de $\frac{1}{4}$ LEL, e para a altura de 0.5 m a partir do diâmetro de 1.06 mm em diante na concentração de $\frac{1}{4}$ LEL, e 2.02 mm em diante para a concentração de $\frac{1}{2}$ LEL. Neste último, é possível visualizar pela mudança de comportamento da pluma nos três últimos pontos dispostos no gráfico da Figura 6-9c-d.

Observa-se ainda nas Figura 6-9c-d que os pontos referentes às alturas de 1 e 2 m e jato livre, praticamente se sobrepõem, indicando que o a altura da fonte e, conseqüentemente, o efeito do solo não interferiram na formação das plumas. Também foi possível visualizar a proximidade dos pontos na análise de extensão para o parâmetro velocidade do vento na altura de 2 m e na condição de jato livre, isso devido ao fato do momento de a pluma dominar nestes casos e em seguida há a dominância da velocidade do vento, além de apontar a ausência de interferência do solo. Já quando se observam os casos a 1 m do solo, somada a presença da ventilação que geram as zonas de turbulência abaixo da pluma, resultam em diferentes valores de extensão e volume.

Quanto ao volume da pluma, este aumenta ao passo que aumenta a pressão de armazenamento (Figura 6-9b), o que está ligado ao aumento do momento do jato que impulsiona mais para frente a pluma com a elevação da pressão; com o aumento do diâmetro de orifício (Figura 6-9d), o que é justificado pelo aumento do fluxo mássico, logo mais propano sendo alimentado à nuvem; e com o aumento da velocidade *counterflow* no intervalo de 0 a -2 m/s (Figura 6-9f), devido ao acúmulo da nuvem de gás ao redor do orifício de liberação ao passo que a pluma segue na tentativa de inverter o sentido de dispersão.

A pluma tem seu volume reduzido frente ao aumento da velocidade do vento em ambos os sentidos de liberação, exceto no intervalo mencionado

anteriormente. Como também diminui com o aumento da altura da fonte de liberação (Figura 6-9h), que a partir de 2 m o valor do volume mantêm-se aproximadamente o mesmo, e com o aumento da concentração (Figura 6-9j).

O espaçamento entre os dados e modelos de regressão obtidos para o volume variando com a pressão aponta para a influência do solo na pluma. Todas as simulações realizadas para uma altura de fonte de 0.5 m, a pluma atingiu o solo, sucedendo valores de volume e extensão maiores que nos casos a 1 e 2 m. Nesses dois casos nota-se que quanto mais distante do solo mais abaixo no gráfico fica o modelo para volume, no entanto na condição de jato livre o resultado apresentou-se maior do que todos os outros. Neste sentido, pode-se dizer que o solo possui um efeito considerável no volume da pluma.

O ajuste dos modelos gerados representado pelo R^2 apresentou-se baixo para a variação da extensão e do volume com a pressão. Assim como na condição de não-equilíbrio, a pressão não possui tanta influência nos resultados como os outros parâmetros de análise. Observa-se uma variação muito pequena na extensão e no volume, havendo uma range pequeno de variação dos resultados em virtude da variação de pressão, logo qualquer variação nos resultados de extensão ou volume na segunda ou terceira casa decimal implica em uma variação considerável no ajuste do modelo. Desta forma, pode-se dizer que as variações observadas nos resultados de pressão não são consideradas preocupantes devido à baixa influência que este parâmetro possui, o que é refletido em resultados de extensão igual a aproximadamente 2.4 m ou 2.51 m para a variação da pressão frente a todos os cenários simulados, havendo ou não a interferência do solo.

Os modelos obtidos ao longo da análise de sensibilidade para uma liberação na condição de equilíbrio termodinâmico encontram-se descritos na Tabela 6.5.

Tabela 6.5 - Equações obtidas pela análise de sensibilidade avaliada para a condição de equilíbrio na concentração de 0.5LEL.

Variável	Altura (m) ou Jato Livre (JL)	Extensão (m)	Volume (m ³)
Pressão (bar)	0.5	$x(P_s) = 2.261e - 05 P_s^4 - 1.239e - 03 P_s^3 + 0.02376 P_s^2 - 0.1925 P_s + 2.497$	$V(P_s) = -0.0001341 P_s^2 + 0.004372 P_s + 0.09752$
	1.0	$x(P_s) = 3.068e - 05 P_s^4 - 1.862e - 03 P_s^3 + 0.04002 P_s^2 - 0.3551 P_s + 3.512$	$V(P_s) = -0.0001513 P_s^2 + 0.004588 P_s + 0.09488$
	2.0	$x(P_s) = 1.385e - 05 P_s^4 + 9.029e - 04 P_s^3 - 0.02158 P_s^2 + 0.2233 P_s + 1.578$	$V(P_s) = -0.000131 P_s^2 + 0.004168 P_s + 0.095$
	JL	$x(P_s) = -1.094e - 05 P_s^4 + 6.938e - 04 P_s^3 - 0.01634 P_s^2 + 0.1696 P_s + 1.819$	$V(P_s) = -0.0001269 P_s^2 + 0.004035 P_s + 0.1034$
Diâmetro (mm)	0.5	$x(d_o) = 2.669 d_o$	$V(d_o) = 0.09269 d_o^3$
	1.0	$x(d_o) = 1.862 d_o$	$V(d_o) = 0.0564 d_o^3$
	2.0	$x(d_o) = 1.867 d_o$	$V(d_o) = 0.05653 d_o^3$
	JL	$x(d_o) = 1.894 d_o$	$V(d_o) = 0.05868 d_o^3$
Velocidade do vento (m/s)	1.0	$x(u_w) = \frac{1.2473 u_w^3 - 3.722 u_w^2 - 37.67 u_w + 220.7}{u_w^2 - 17.06 u_w + 86.76}$	$V(u_w) = \frac{0.09266 u_w^2 + 0.4342 u_w + 0.5932}{u_w^2 + 4.708 u_w + 5.686}$
	2.0	$x(u_w) = \frac{0.1056 u_w^3 + 2.278 u_w^2 + 10.31 u_w + 18.51}{u_w^2 + 4.286 u_w + 7.229}$	$V(u_w) = \frac{0.0705 u_w^2 + 0.2198 u_w + 0.5452}{u_w^2 + 3.64 u_w + 4.464}$
	JL	$x(u_w) = \frac{0.1263 u_w^3 + 2.272 u_w^2 + 9.163 u_w + 16.36}{u_w^2 + 3.85 u_w + 6.468}$	$V(u_w) = \frac{0.06704 u_w^2 + 0.2124 u_w + 0.5648}{u_w^2 + 3.605 u_w + 4.474}$
Altura (m)	-	$x(h) = 1.682e - 04 h^{-6.898} + 2.484$	$V(h) = 6.877e - 06 h^{-6.975} + 0.1345$
LEL	JL	$x(LEL) = 0.02597 LEL^{-1}$	$V(LEL) = 1.539e - 07 LEL^{-3}$

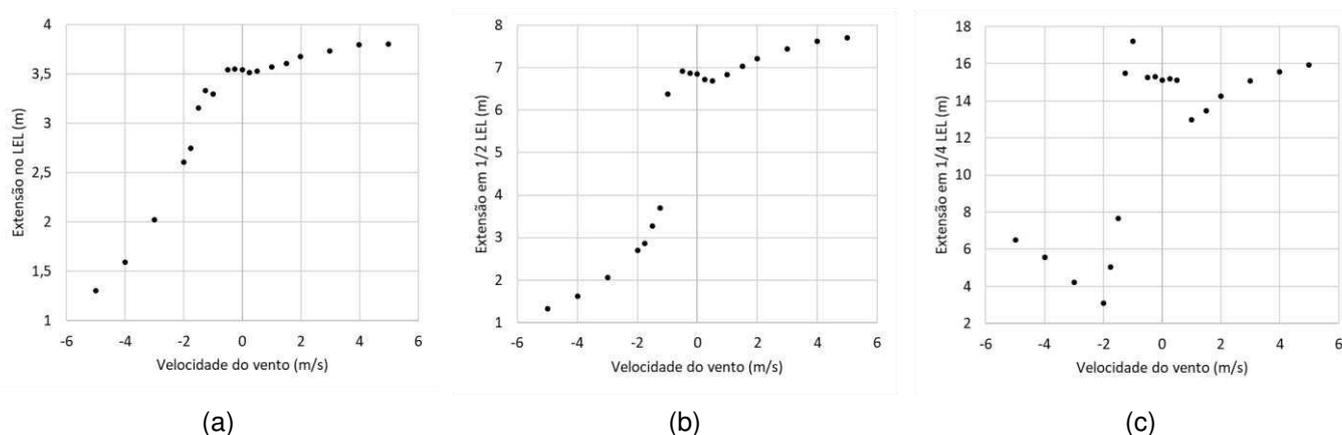
6.4 EFEITO DO SOLO E DA VELOCIDADE DO VENTO NO CENÁRIO DE UMA LIBERAÇÃO BIFÁSICA

Para a avaliação do efeito da velocidade do vento, foi observada a condição de não-equilíbrio, conforme os dados contidos na Tabela I. 22. Segue na Figura 6-10 a representação gráfica das extensões perigosas da nuvem de gás para as concentrações de interesse variando com a velocidade do vento.

A partir da Figura 6-10 é possível observar o comportamento descrito anteriormente de aumento da extensão com a velocidade do vento no sentido do jato liberação. Comparativamente ao estudo realizado por Barros et al. (2020), nota-se que no LEL o comportamento difere do dos autores para os resultados de extensão sob efeito de ventos contra (Figura 6-10a). Observou-se uma tendência decrescente da extensão com o aumento da velocidade para o vento

no sentido oposto ao jato de liberação, o que diferiu da tendência observada para as simulações de jato de gás no trabalho dos autores, que observaram um comportamento ascendente. Esta diferença pode estar relacionada ao tipo de liberação e o tipo de gás simulado. No presente caso o jato tratado é bifásico, a nuvem de gás resultante é densa e é considerado o efeito da gravidade, o que difere do caso observado no trabalho de Barros et al. (2020) que trata de uma liberação de jato de gás e não leva em consideração o efeito da gravidade, logo não pode ser verificado o empuxo da nuvem no ambiente.

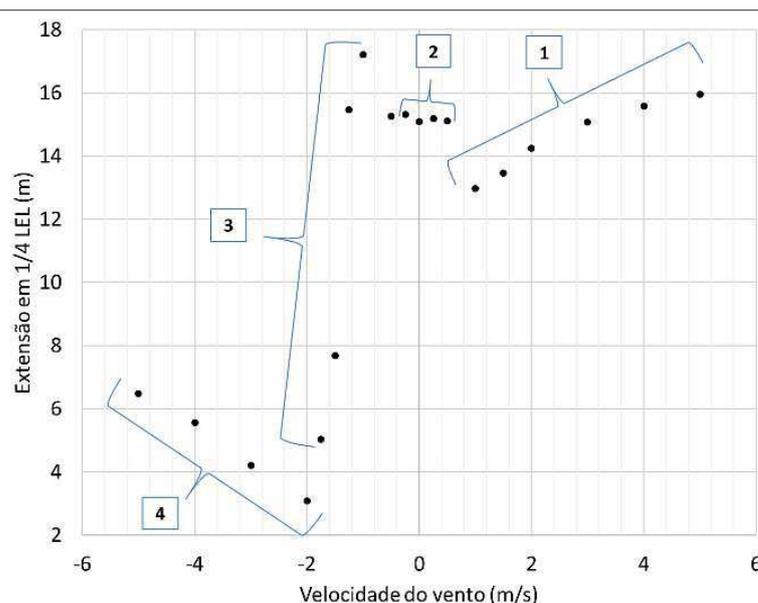
Figura 6-10 - Extensão da nuvem de gás de propano resultante de uma liberação bifásica sob o efeito da velocidade do vento avaliados nas concentrações do (a) LEL, (b) 0.5LEL e (c) 0.25LEL.



Na Figura 6-10c, para a concentração em $\frac{1}{4}$ LEL, percebem-se descontinuidades na tendência do perfil em ambos os sentidos de velocidade do vento. Os dados representados compõem quatro cenários que se expressam em trechos com uma tendência específica. Na Figura 6-11 estão delimitados os quatro cenários. No cenário 1, a pluma se desenvolve e cresce no sentido da liberação dado o efeito do vento no mesmo sentido, e não sofre diretamente o efeito do solo, logo é uma pluma com o seu formato bem definido conforme visto anteriormente na Figura 6-4c. No cenário 2, o momento do vento não é alto o suficiente para vencer o empuxo e assim ocorre a queda da pluma. Neste cenário a maior extensão observada foi no sentido do jato de liberação e observou-se o contato da pluma com o solo, o que implica no espalhamento da pluma no solo e a diminuição da diluição. Observa-se também que o intervalo consiste de ventos *coflow*, *couterflow* e vento nulo.

Logo após o cenário 2, encontra-se a velocidade de -0.75 m/s, em que a pluma atinge o solo e espalha-se lateralmente de forma considerável, mais especificamente ao longo do eixo z, porém com a ação do vento numa tentativa de inversão da pluma, levando a pluma a acumular-se nas proximidades da fonte de liberação. Prosseguindo para o aumento da velocidade *counterflow*, o cenário 3 é caracterizado por plumas que estão em contato com o solo, e a maior extensão observada ocorre no sentido oposto ao jato. Ou seja, ocorre a inversão da pluma, e esta passa a crescer na região por trás do orifício de liberação. No cenário 4, a pluma prossegue desenvolvendo-se no sentido contrário ao jato, mantendo-se suspensa no ambiente sem contato com o solo. Há um aumento nos valores de extensão ao passo que a velocidade do vento aumenta.

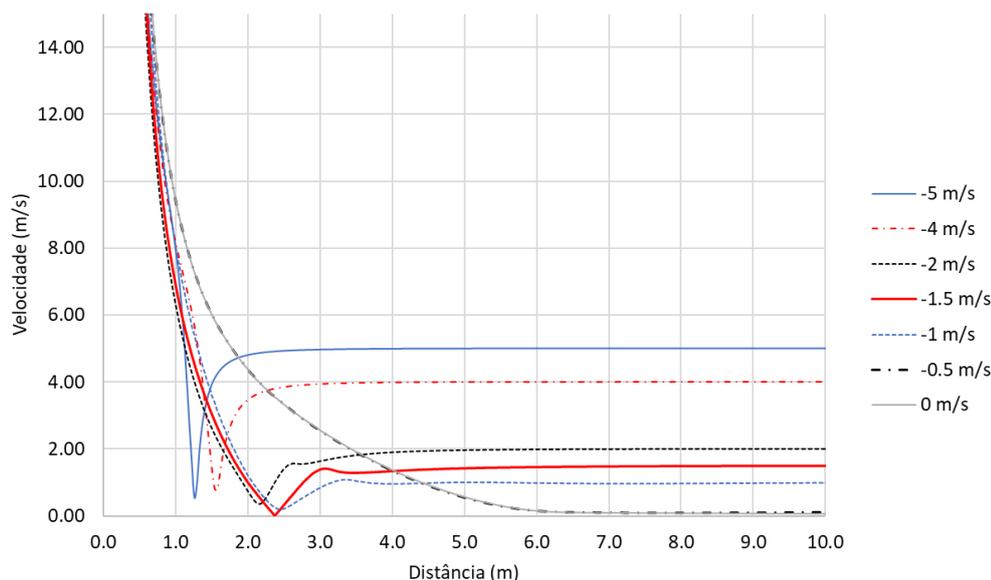
Figura 6-11 - Quatro diferentes cenários do comportamento da pluma frente a ação da velocidade do vento. Dados avaliados em $1/4$ LEL.



A partir do perfil de velocidade da pluma avaliado ao longo do eixo central de liberação (Figura 6-12), para o intervalo de velocidade de 0 a -5 m/s, observa-se a posição e as velocidades para as quais ocorre a inversão da pluma. Isto foi possível de visualizar devido à velocidade relativa da pluma tender a zero, avaliando o eixo no mesmo sentido do jato, indicando não mais o crescimento da nuvem na região *coflow*. Assim, ao passo que o momento gerado pela velocidade do vento segue vencendo o momento do jato, a pluma segue se

acumulando ao redor da fonte e crescendo agora no sentido contrário ao jato. Percebe-se que a inversão da pluma começa a ser visualizada para velocidades acima de -0.5 m/s.

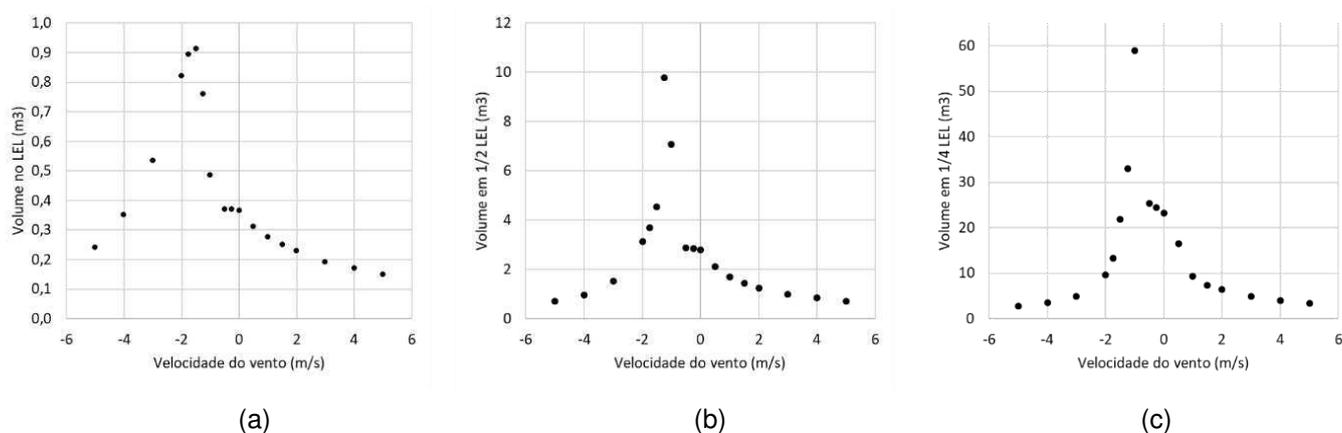
Figura 6-12 – Perfil da velocidade da nuvem de gás ao longo do eixo central de liberação para o vento no sentido oposto ao jato de liberação.



Quanto ao volume da nuvem de gás, na **Erro! Autoreferência de indicador não válida.** verifica-se uma tendência conjunta avaliada em todas as concentrações, em que o volume diminui mediante o aumento da velocidade do vento. Este comportamento resulta do aumento da diluição com o aumento da velocidade do vento, isso devido a intensificação da turbulência. Nota-se, também, um intervalo de aumento do volume com o aumento da velocidade, porém no sentido oposto, até atingir -1 m/s, em seguida esse comportamento de inverte.

Trazendo para a classificação de áreas, a norma internacional IEC 60079-10-1 (2020) não prevê a ação de vento contrário ao jato, nem mesmo que ocorre o aumento da extensão e do volume mediante a velocidade do vento no sentido da liberação, e nem que o volume perigoso por ser maior com o aumento da velocidade do vento no sentido contrário ao jato.

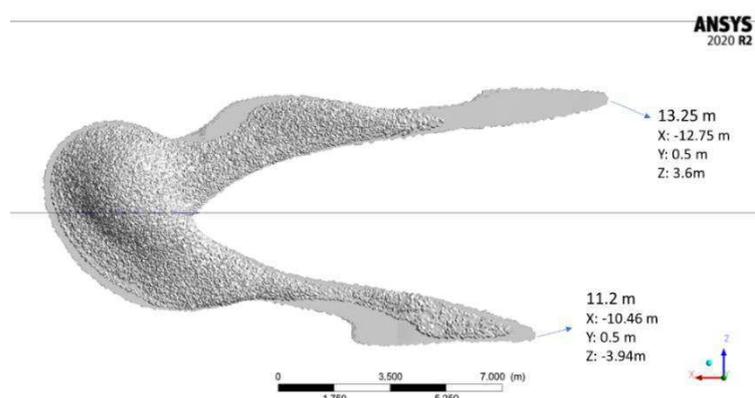
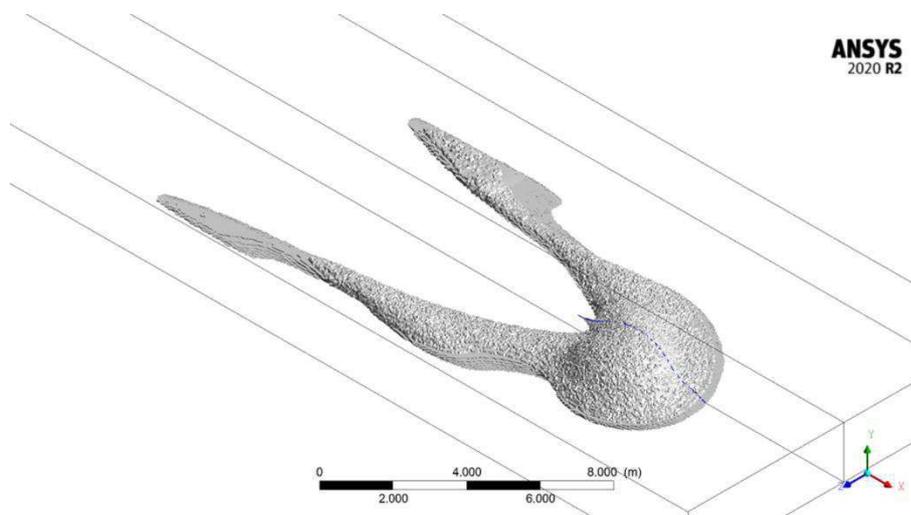
Figura 6-13 - Volume da nuvem de gás de propano resultante de uma liberação bifásica sob o efeito da velocidade do vento avaliados nas concentrações do (a) LEL, (b) 0.5LEL e (c) 0.25LEL.



Alguns aspectos da nuvem de gás densa formada pela liberação bifásica de propano em estudo devem ser destacados. Segundo Hanna e Britter (2002) a nuvem densa ela tende a possuir um tamanho lateral maior do que as plumas neutras ou leves, e quando na presença de uma reduzida velocidade efetiva do ambiente haverá a tendência de formação de uma nuvem maior nas direções y e z dada a altura no eixo x. Esta característica da pluma densa foi verificada neste trabalho, conforme observado anteriormente na Figura 6-6a, e reportado na análise de sensibilidade da altura da fonte de liberação.

Alguns casos simulados com vento contra resultou em uma nuvem que se concentra ao redor do orifício de liberação e segue se espalhando pelo solo no sentido oposto ao jato de liberação. Ao passo que a velocidade em ambos os sentidos aumenta e a nuvem não mais toca o solo, ela passa a ter um formato mais afinado quanto maior for a velocidade do vento. Um comportamento curioso foi observado para a velocidade de -2 m/s (Figura 6-14), em que a nuvem de gás em $\frac{1}{4}$ LEL escorre lateralmente por trás do orifício, havendo o crescimento da nuvem de forma que ela não se uni por trás do orifício, mas ela segue se espalhando lateralmente. Este comportamento observado prever regiões próxima ao orifício que não confere risco, porém em uma dada posição distante do orifício o mesmo não ocorre como pode ser visto na Figura 6-14b.

Figura 6-14 - Comportamento da pluma frente a velocidade do vento de -2 m/s. (a) vista em perspectiva e (b) vista superior, ilustrando o espalhamento lateral da pluma.



6.5 CLASSIFICAÇÃO DE ÁREA: CFD VS IEC 60079-10-1

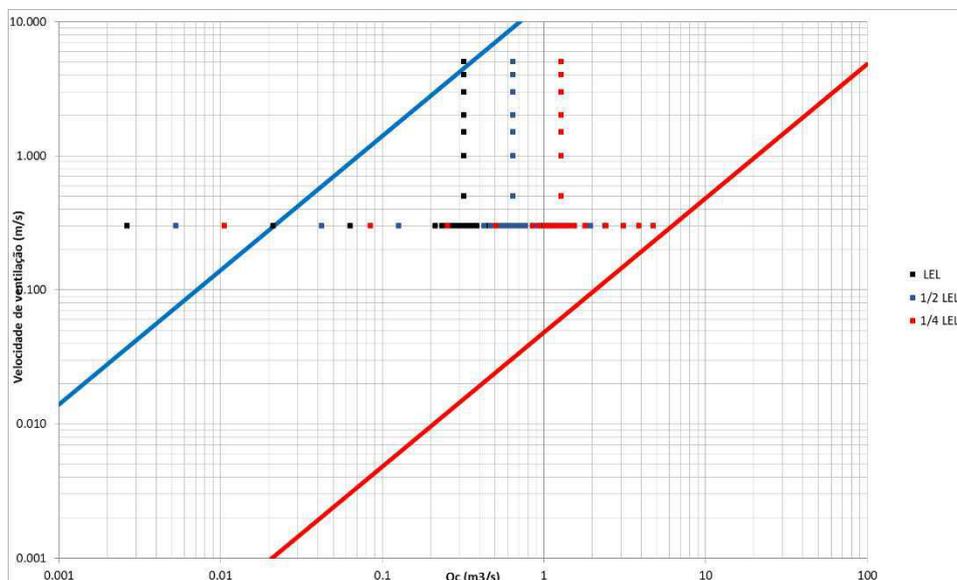
Para a classificação de área a luz da norma internacional IEC 60079-10-1 (2020), foram tomados os casos simulados descritos nas tabelas em ANEXO, e comparados os resultados da classificação utilizando a norma e os obtidos via simulação CFD. A concentração escolhida para a classificação foi o $\frac{1}{2}$ LEL. O grau de liberação considerado foi secundário a fim de representar a realidade do processo discutido ao longo do desenvolvimento do projeto. A liberação se deu

em ambiente aberto com boa disponibilidade de ventilação, sendo a ventilação natural.

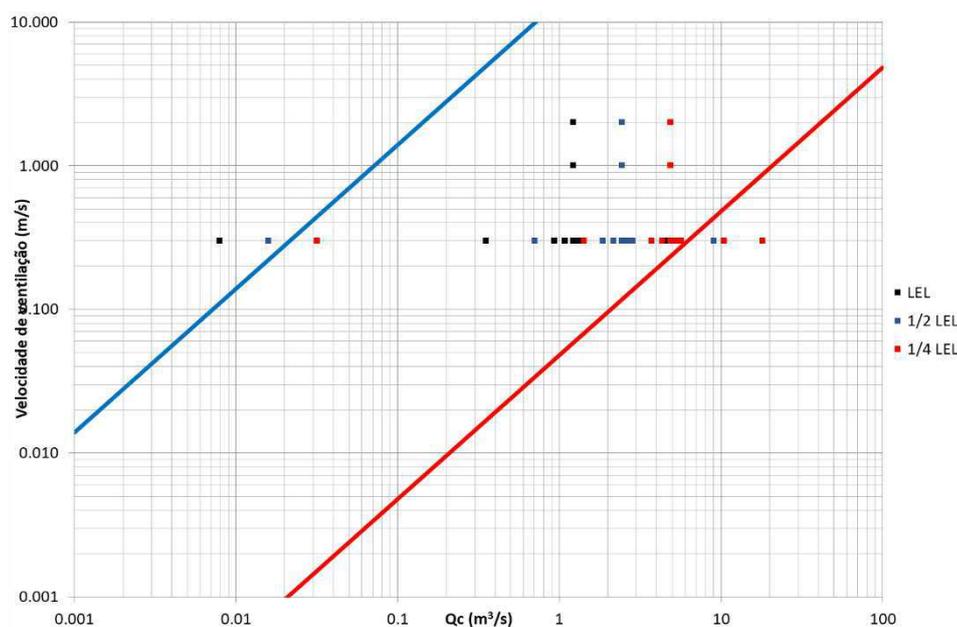
No tópico 2.2, são descritas as etapas para realizar uma classificação de área utilizando a IEC 60079-10-1. Dentre as etapas está a determinação da efetividade de ventilação, ou grau de diluição, e em seguida a disponibilidade de ventilação. Com base no cálculo realizado para obter a liberação característica e a informação da velocidade de ventilação, foi possível determinar o grau de diluição (Figura 2-3). Uma vez que se trata de uma liberação em ambiente aberto, para fins de classificação de área a luz da norma IEC 60079-10-1 (2020), a velocidade de ventilação considerada será de 0.3 m/s nos casos em que a velocidade do vento foram nulas. Esta é uma velocidade aproximada indicada pela norma nos casos que se tratam da liberação de gás pesado ou neutro, em ambiente aberto, onde o ponto de emissão se encontra a uma altura menor ou igual a 2m. A título de simulação CFD é uma consideração coerente tendo em vista que no domínio simulado as condições de contorno do ambiente tratadas como *Opening* conferem ao sistema entrada e saída de fluxo, o que implica dizer que não se trata de um domínio fechado, e que uma ventilação mínima ocorre ao longo do domínio como resultados da resolução dos balanços.

Na Figura 6-15a estão definidos o grau de diluição conforme a posição dos dados referente a liberação em equilíbrio, e na Figura 6-15b referente a liberação em não-equilíbrio. Os pontos situados ao lado esquerdo da reta azul indicam alto grau de diluição, e foram observados nos casos de menor diâmetro de orifício, e de velocidade de ventilação igual a 5 m/s no caso do fluxo em equilíbrio. Já os pontos situados ao lado direito da reta vermelha indicam baixo grau de diluição, que foi observado nos casos do fluxo em não-equilíbrio para os casos de maior diâmetro de orifício. A maior parte dos pontos se concentram na região de diluição média.

Figura 6-15 - Determinação do grau de diluição para a liberação na condição de (a) equilíbrio e de (b) não-equilíbrio.



(a)



(b)

Destaca-se o fato de que a norma IEC 600079-10-1 (2020) não leva em consideração a distância da fonte de liberação com relação ao solo na determinação do grau de diluição. Como visto ao longo deste trabalho, há uma redução significativa na diluição da pluma quando em contato com o solo,

implicando em um aumento considerável de extensão e volume da pluma a depender da altura e do tipo de liberação, o que não é considerado na norma. Para a determinação do grau de diluição a norma considera apenas a taxa de liberação mássica, a densidade do gás da vizinhança (ar atmosférico no presente caso), a velocidade de ventilação e a concentração de interesse, deixando para trás o fator altura da fonte de liberação.

Além da altura da fonte, o sentido da velocidade do vento com relação a ao fluxo de liberação da fonte não é levado em conta na definição do grau de diluição, sendo este um fator que implica diretamente na diluição da pluma.

Na Tabela 6.6 e Tabela 6.7 encontram-se a classificação do tipo de zona baseado nas condições de liberação em equilíbrio e não-equilíbrio, respectivamente. Na Tabela 6.7 encontra-se uma previsão da classificação do tipo de zona com base no volume hipotético calculado com base nos dados coletados em CFD, e em seguida, é definido o tipo de zona aplicando a norma IEC 60079-10-1. O cálculo do volume hipotético foi realizado com base na Eq. (6.1). Este volume é um indicador do grau de diluição, e aponta para a vazão de ventilação mínima capaz de diluir a pluma à concentração do LEL (SOUZA, 2016). Logo, foi observado o volume ocupado pela pluma cuja concentração ao longo de toda a pluma é a concentração de avaliação em torno do LEL (C_{LEL}), ou seja, representa o volume no qual a concentração encontra-se distribuída uniformemente ao longo da pluma. Esta concentração é o indicador do quanto a ventilação contida no ambiente foi capaz de diluir a pluma para a concentração de análise. Onde C_m corresponde a concentração média da pluma delimitada pela concentração em torno do LEL.

$$V_z C_{LEL} = V_{pluma} C_m \quad (6.1)$$

Em ambas as Tabelas (Tabela 6.6 e Tabela 6.7) nota-se que a maior parte dos casos foram classificados por Zona 2 em virtude do grau de liberação secundário e da velocidade de ventilação utilizada, indicada pela norma quando esta é tomada como base para a classificação. Os casos relacionados ao menor diâmetro de orifício simulado (0.1 mm), se enquadraram em alta diluição e na classificação do tipo Área não-classificada (ou área não perigosa) apresentando

um indicador de zona teórica do tipo Zona 2 com extensão desprezível em condições normais.

Tabela 6.6 - Classificação de área baseada na IEC 60079-10-1 (2020) para a liberação bifásica de propano na condição de equilíbrio termodinâmico no orifício de liberação. Concentração de análise: $\frac{1}{2}$ LEL.

Parâmetro	Casos	Liberação característica (m ³ /s)	Velocidade do vento (m/s)	Grau de diluição	Tipo de zona IEC
P_s	1	0.4702	0	Médio	Zona 2
	2	0.5125	0	Médio	Zona 2
	3	0.5495	0	Médio	Zona 2
	4	0.5812	0	Médio	Zona 2
	5	0.6129	0	Médio	Zona 2
	6	0.6446	0	Médio	Zona 2
	7	0.6710	0	Médio	Zona 2
	8	0.6974	0	Médio	Zona 2
	9	0.7238	0	Médio	Zona 2
	10	0.7450	0	Médio	Zona 2
	11	0.7714	0	Médio	Zona 2
d_o	12	0.0053	0	Alto	Área não-classificada (Zona 2 NE)
	13	0.0423	0	Médio	Zona 2
	14	0.1268	0	Médio	Zona 2
	15	0.2536	0	Médio	Zona 2
	16	0.4280	0	Médio	Zona 2
	17	0.6446	0	Médio	Zona 2
	18	0.9035	0	Médio	Zona 2
	19	1.2099	0	Médio	Zona 2
	20	1.5534	0	Médio	Zona 2
	21	1.9443	0	Médio	Zona 2
	22	2.3829	0	Médio	Zona 2
u_w	23	0.6446	- 5	Médio	Zona 2
	24	0.6446	- 4	Médio	Zona 2
	25	0.6446	- 3	Médio	Zona 2
	26	0.6446	- 2	Médio	Zona 2
	27	0.6446	- 1.5	Médio	Zona 2
	28	0.6446	- 1	Médio	Zona 2
	29	0.6446	- 0.5	Médio	Zona 2
	30	0.6446	0	Médio	Zona 2
	31	0.6446	0.5	Médio	Zona 2
	32	0.6446	1	Médio	Zona 2
	33	0.6446	1.5	Médio	Zona 2
34	0.6446	2	Médio	Zona 2	

(Continua...)

Tabela 6.6 (Continuação...)

Parâmetro	Casos	Liberação característica (m ³ /s)	Velocidade do vento (m/s)	Grau de diluição	Tipo de zona IEC
	35	0.6446	3	Médio	Zona 2
	36	0.6446	4	Médio	Zona 2
	37	0.6446	5	Médio	Zona 2

Observando a Tabela 6.7, tendo em vista a estimativa de classificação pelo volume hipotético, de acordo com Tommasini (2013), versões anteriores da norma IEC 60079-10-1 descreve que um volume de pluma será considerado desprezível quando o volume hipotético for menor que 0.1 m³. Por se tratar de uma liberação de grau secundário, a avaliação do volume hipotético é feita com base na concentração do ½ LEL (SANTON et al., 2012; IVINGS e KELSEY, 2014). Ivings et al. (2008) mencionam que V_z menor que 0.1 m³ indica um elevado grau de diluição, e ao se tratar do grau de liberação secundário, este tem a classificação do tipo Zona 2 ED (Extensão Desprezível), enquadrada em área não-classificada. No caso contrário, ($V_z > 0.1 m^3$) a diluição pode ser média ou baixa e a classificação do tipo Zona 2 ou Zona 1, respectivamente. Como não se consegue estimar o grau de diluição pelo volume hipotético, se médio ou baixo no presente caso, mais estudos precisam ser desenvolvidos.

Neste sentido, foi analisada a classificação de área na condição de não-equilíbrio com base no volume hipotético, conforme segue na Tabela 6.7. Os dados de volume hipotético estão dispostos de acordo com a altura de liberação simulada, seguida da classificação prevista segundo o valor do volume hipotético. Foi observado que no caso com menor diâmetro de orifício a classificação foi do tipo área não-classificada, o que se justifica pelo fato do volume hipotético neste caso ser menor que 0.1 m³. O mesmo resultado foi previsto pela norma IEC.

Tabela 6.7 – Classificação de área baseada na IEC 60079-10-1 (2020) para a liberação bifásica de propano na condição de não-equilíbrio no orifício de liberação. Concentração de análise: ½ LEL.

Parâmetro	Liberação característica (m ³ /s)	Velocidade do vento (m/s)	Grau de diluição	Tipo de zona IEC	0.5 m		1.0 m		2.0 m		Jato Livre	
					Volume hipotético (m ³)	Previsão de zona	Volume hipotético (m ³)	Previsão de zona	Volume hipotético (m ³)	Previsão de zona	Volume hipotético (m ³)	Previsão de zona
P_s	0.9299	0	Médio	Zona 2	42.692	Zona 2 ou 1	36.383	Zona 2 ou 1	33.960	Zona 2 ou 1	37.199	Zona 2 ou 1
	1.0884	0	Médio	Zona 2	47.401	Zona 2 ou 1	42.167	Zona 2 ou 1	36.742	Zona 2 ou 1	40.763	Zona 2 ou 1
	1.2205	0	Médio	Zona 2	49.268	Zona 2 ou 1	43.964	Zona 2 ou 1	36.017	Zona 2 ou 1	42.159	Zona 2 ou 1
	1.3288	0	Médio	Zona 2	51.976	Zona 2 ou 1	45.287	Zona 2 ou 1	36.209	Zona 2 ou 1	41.957	Zona 2 ou 1
	1.4239	0	Médio	Zona 2	52.096	Zona 2 ou 1	45.122	Zona 2 ou 1	35.415	Zona 2 ou 1	41.469	Zona 2 ou 1
	0.0079	0	Alto	Área não-classificada (Zona 2ED)	0.008	Área não-classificada (Zona 2ED)	0.010	Área não-classificada (Zona 2ED)	0.010	Área não-classificada (Zona 2ED)	0.010	Área não-classificada (Zona 2ED)
d_o	0.3540	0	Médio	Zona 2	6.507	Zona 2 ou 1	5.290	Zona 2 ou 1	5.145	Zona 2 ou 1	5.257	Zona 2 ou 1
	1.2205	0	Médio	Zona 2	49.268	Zona 2 ou 1	43.964	Zona 2 ou 1	36.017	Zona 2 ou 1	37.990	Zona 2 ou 1
	2.6048	0	Médio	Zona 2	157.349	Zona 2 ou 1	124.140	Zona 2 ou 1	122.013	Zona 2 ou 1	139.722	Zona 2 ou 1
	4.5121	0	Baixo	Zona 1 e mesmo Zona 0 ^d	303.584	Zona 2 ou 1	213.736	Zona 2 ou 1	232.681	Zona 2 ou 1	291.147	Zona 2 ou 1
u_w	1.2205	- 2	Médio	Zona 2	115.349	Zona 2 ou 1	63.895	Zona 2 ou 1	29.481	Zona 2 ou 1	27.761	Zona 2 ou 1
	1.2205	- 1	Médio	Zona 2	51.544	Zona 2 ou 1	44.395	Zona 2 ou 1	60.197	Zona 2 ou 1	41.290	Zona 2 ou 1
	1.2205	0	Médio	Zona 2	49.268	Zona 2 ou 1	43.964	Zona 2 ou 1	36.017	Zona 2 ou 1	37.990	Zona 2 ou 1
	1.2205	1	Médio	Zona 2	37.268	Zona 2 ou 1	24.338	Zona 2 ou 1	24.852	Zona 2 ou 1	27.060	Zona 2 ou 1
	1.2205	2	Médio	Zona 2	28.842	Zona 2 ou 1	19.515	Zona 2 ou 1	19.902	Zona 2 ou 1	21.937	Zona 2 ou 1

O sobrescrito ^d indicado expresso na norma significa dizer que a classificação poderá ser Zona 0 se a ventilação for fraca o suficiente que se aproxime de uma condição sem ventilação, e a liberação for tal, que haja uma atmosfera de gás explosivo virtualmente continuamente.

Além de definir o tipo de zona, faz-se necessário prever a extensão da área perigosa. As extensões de todos os casos simulados das análises de sensibilidade foram coletadas para a concentração em $\frac{1}{2}$ LEL. Vale destacar que os resultados em CFD foram tomados mediante a maior extensão observada, levando em consideração todos os eixos do domínio. Já com relação a norma IEC 60079-10-1 (2020), baseou-se no digrama (Figura 6-16) para obtenção da extensão com base na liberação característica da norma. Na Tabela 6.8 estão os resultados referentes as extensões em CFD e as coletadas utilizando o diagrama da norma IEC 60079-10-1(2020) conforme ilustrado na Figura 6-16a para o conjunto de casos na condição de equilíbrio termodinâmico, e na Tabela 6.9 para a condição de não-equilíbrio (Figura 6-16b).

Tabela 6.8 – Extensão perigosa da área classificada observada para a condição de equilíbrio termodinâmico, em $\frac{1}{2}$ LEL.

Parâmetro	Casos	Extensão IEC (m)		0.5 m	1.0 m	2.0 m	Jato Livre
		Difuso	Gás pesado	Extensão (m)	Extensão (m)	Extensão (m)	Extensão (m)
P_s (bar)	8	2.949	6.172	2.465	2.404	2.390	2.440
	9.2	3.078	6.443	2.479	2.406	2.402	2.459
	10.4	3.187	6.671	2.493	2.410	2.441	2.477
	11.6	3.278	6.861	2.493	2.416	2.403	2.464
	12.8	3.366	7.046	2.520	2.448	2.429	2.472
	14	3.452	7.226	2.522	2.473	2.419	2.475
	15.2	3.522	7.372	2.516	2.440	2.419	2.486
	16.4	3.591	7.516	2.514	2.449	2.417	2.467
	17.6	3.658	7.657	2.511	2.465	2.425	2.481
	18.8	3.711	7.768	2.510	2.436	2.408	2.473
d_o (mm)	20	3.777	7.905	2.508	2.429	2.423	2.478
	0.1	1.0	1.0	0.208	0.168	0.214	0.216
	0.34	1.0	1.850	0.679	0.594	0.671	0.687
	0.58	1.531	3.205	1.156	1.066	1.141	1.159
	0.82	2.165	4.532	1.586	1.488	1.556	1.573
	1.06	2.813	5.888	2.055	1.977	2.010	2.039
	1.3	3.452	7.226	2.523	2.461	2.457	2.475
	1.54	4.087	8.555	3.021	2.868	2.879	2.932
	1.78	4.730	9.900	3.815	3.311	3.293	3.374
	2.02	5.359	11.217	5.905	3.761	3.772	3.819
u_w (m/s)	2.26	5.996	12.550	7.013	4.217	4.220	4.282
	2.5	6.638	13.893	7.852	4.645	4.628	4.681
	-5	3.452	5.109	0.955	0.957	0.954	0.898

(Continua...)

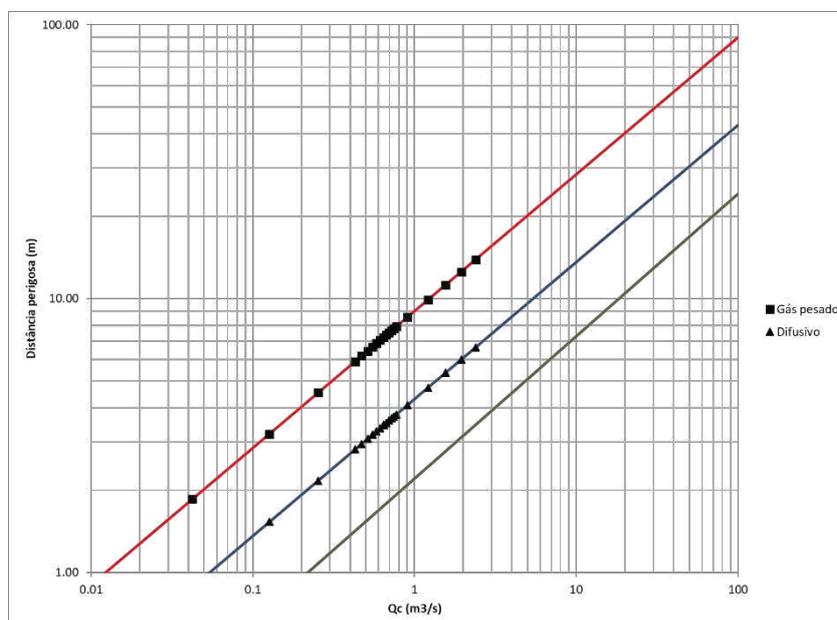
Tabela 6.8 (Continuação...)

Parâmetro	Casos	Extensão IEC (m)		0.5 m	1.0 m	2.0 m	Jato Livre
		Difuso	Gás pesado	Extensão (m)	Extensão (m)	Extensão (m)	Extensão (m)
u_w (m/s)	-4	3.452	5.109	1.199	1.187	1.186	1.171
	-3	3.452	5.109	1.621	1.563	1.560	1.528
	-2	3.452	5.109	4.609	2.332	2.238	2.135
	-1.5	3.452	5.109	2.610	2.550	2.693	2.541
	-1	3.452	5.109	2.510	2.483	2.631	2.666
	-0.5	3.452	5.109	2.483	2.484	2.497	2.478
	0	3.452	5.109	2.503	2.482	2.477	2.475
	0.5	3.452	5.109	2.484	2.474	2.650	2.475
	1	3.452	5.109	2.497	2.475	2.477	2.481
	1.5	3.452	5.109	2.506	2.487	2.492	2.499
	2	3.452	5.109	2.514	2.507	2.506	2.517
	3	3.452	5.109	2.536	2.539	2.532	2.556
	4	3.452	5.109	2.559	2.550	2.555	2.580
	5	3.452	5.109	2.570	3.606	2.561	2.582

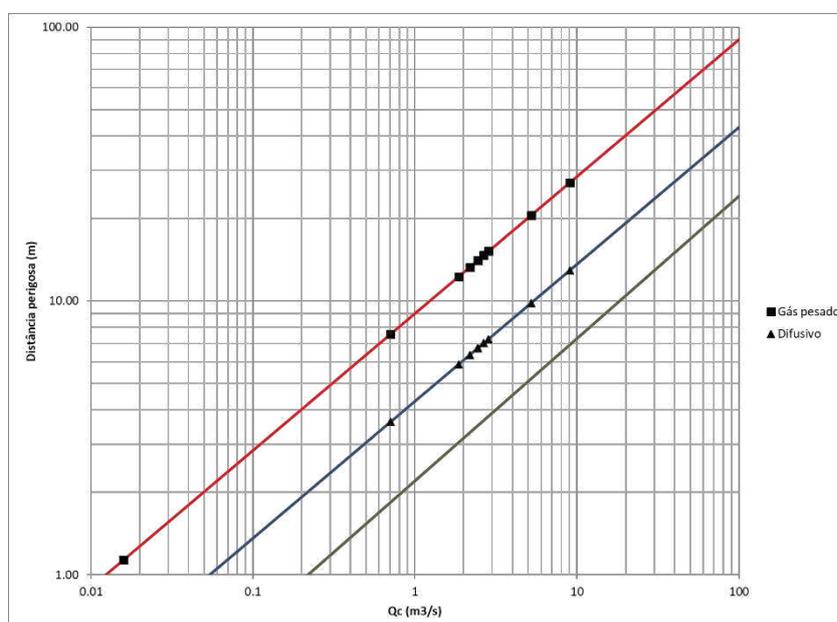
Tabela 6.9 - Extensão perigosa da área classificada observada para a condição de não-equilíbrio, nem ½ LEL.

Parâmetro	Velocidade do vento (m/s)	Extensão IEC (m)		0.5 m	1.0 m	2.0 m	Jato Livre
		Difuso	Gás pesado	Extensão (m)	Extensão (m)	Extensão (m)	Extensão (m)
P_s (bar)	8	5.864	12.274	9.912	8.570	7.630	6.441
	11	6.344	13.279	10.516	9.067	7.823	6.690
	14	6.718	14.061	10.914	9.340	6.859	6.787
	17	7.010	14.672	11.334	9.488	6.755	6.806
	20	7.256	15.188	11.590	9.491	6.693	6.776
d_o (mm)	0.1	1.0	1.133	0.561	0.577	1.168	0.559
	0.7	3.618	7.573	5.565	3.815	3.752	3.722
	1.3	6.718	14.061	10.914	9.340	6.859	6.675
	1.9	9.815	20.542	16.386	13.962	12.222	9.600
	2.5	12.917	27.036	21.167	18.220	16.244	11.779
u_w (m/s)	- 2	6.718	14.061	6.674	4.936	2.700	2.646
	- 1	6.718	14.061	11.105	9.358	6.380	3.534
	0	6.718	14.061	10.914	9.340	6.859	6.675
	1	6.718	14.061	11.903	7.034	6.847	7.026
	2	6.718	14.061	13.112	7.301	7.222	7.311

Figura 6-16 – Definição da extensão perigosa baseado no diagrama da norma IEC 60079-10-1 (2020) para os fluxos (a) em equilíbrio termodinâmico e (b) em não-equilíbrio termodinâmico, avaliados em 1/2 LEL.



(a)



(b)

Para a obtenção da extensão pelo diagrama (Figura 6-16) faz-se necessário selecionar a linha que melhor representa a liberação em avaliação. Mediante a compreensão do assunto ao longo deste trabalho, dado o tratamento da

liberação bifásica como subsônica e sendo propano a substância liberada e de densidade maior que a do ar, o que também é mencionado ao longo do texto da norma IEC, é descartada a opção da reta do tipo jato. Uma vez que as características da liberação se enquadram tanto na reta de liberação difusa como na de gás denso, ambas serão tratadas aqui. Foi ponderada a característica da liberação em cada condição de estudo, observando o momento do jato e comportamento da pluma. A condição de equilíbrio possui um comportamento mais próximo ao jato difuso, enquanto que a condição de não equilíbrio se aproxima ao comportamento da reta de gás pesado. O que fica evidenciado na Tabela 6.9 onde os valores destacados em cinza indicam os casos em que a pluma cai e atinge o solo na concentração do $\frac{1}{2}$ LEL.

Sem o conhecimento prévio do fenômeno dada as características de liberação, fica, porém, dúvida a escolha da reta referente ao tipo de liberação com base na norma para a obtenção da extensão da zona. Não é possível selecionar com segurança a reta sem um bom conhecimento prévio do fenômeno. Pode-se apostar no pior cenário, porém ele poderá superestimar a classificação.

Na Tabela 6.8 é possível observar que a na maioria dos casos o valor da norma IEC se apresentou aproximadamente 1.0 m maior do que o CFD, e apenas nos casos de menor pressão (8 bar) e diâmetro de orifício de 0.58 mm foi que os valores se aproximaram. Alguns casos merecem destaque. Onde a velocidade do vento variou entre -3 e -5 m/s, a extensão pela IEC foi consideravelmente maior do que as verificadas em CFD, sendo na ordem de aproximadamente 2.0 m a diferença observada. Ressaltando a deficiência de a norma prever o efeito do vento. Na velocidade do vento de -2 m/s e nos diâmetros de orifício de 2.26 e 2.5 mm observou-se o efeito do solo devido à altura da fonte à 0.5 m, nestes casos a ausência da diluição concedeu extensões perigosas maiores do que quando seguindo a norma, aproximadamente 1.0 m. Nas outras alturas simuladas referentes aos mesmos casos, as extensões se mantiveram dentro da margem de 1.0 a 2.0 m aproximadamente maior para que o CFD. A variação média geral dos valores de extensão para a liberação na condição de equilíbrio foi de 1.011 m maior para a norma IEC 60079-10-1.

Para a condição de não-equilíbrio, observando a Tabela 6.9 e comparando com os dados referentes a gás pesado, nota-se que boa parte dos casos atingiu o solo nas simulações CFD, e mesmo assim a norma IEC apresentou extensões bem maiores principalmente nos casos para alturas de fonte a 1.0, 2.0 m e na condição de jato livre. Para essas três posições de orifício a diferença média observada na qual a norma IEC se achou maior que a simulação CFD, foi de 5.35, 6.94 e 7.81 m, respectivamente. No caso a 0.5 m do solo a diferença observada foi menor, na ordem de 3.17 m menor que a norma IEC. Numa média geral as extensões observadas pela norma se apresentou 1.6 vezes maior que a extensão em CFD nos casos do fluxo em equilíbrio, e 1.9 vezes para o fluxo em não equilíbrio.

Observando os resultados em CFD nota-se que nos casos da fonte a 2.0 m o aumento da pressão levou a redução da extensão. Isso se dá pelo fato de que o aumento de pressão favorece o aumento de *entrainment* de ar para dentro da nuvem devido ao aumento do momento do jato com a pressão. Neste caso, eleva-se a turbulência ao redor da pluma propiciando maior diluição e, conseqüentemente, menor extensão de pluma na concentração de interesse quando comparado com pressões de armazenamento menores.

CAPÍTULO 7 CONCLUSÕES

CAPÍTULO 7 CONCLUSÕES **123**

7.1 CONCLUSÕES **123**

7.2 SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS **125**

7.1 CONCLUSÕES

Através do presente trabalho foi possível compreender a complexidade associada a uma liberação bifásica, além de percorrer os diferentes cenários que podem ser gerados neste tipo de liberação, e como eles se comportam em uma classificação de área. Mediante os cenários bifásicos e a necessidade de estudo, foi possível comprovar que a técnica de CFD, dada a modelagem utilizada, foi capaz de prever os cenários de uma liberação bifásica, apresentando resultados compatíveis aos dados disponíveis na literatura tanto experimentais como obtidos por outras técnicas numéricas.

Não se restringir a convencional liberação bifásica em equilíbrio termodinâmico, como em sua maioria na literatura, ampliou o range de análise dos cenários de liberação permitindo avaliar de perto a condição de não-equilíbrio, comprovando o que Manna e Lees (2005) menciona como sendo o cenário mais perigoso.

Através das simulações em CFD foi possível observar o efeito do empuxo e assim a flutuabilidade negativa que uma nuvem de propano possui. Dada a característica da liberação, notou-se a dominância do momento da pluma e da atmosfera sob a pluma, e em alguns casos implicou na queda da pluma e contato com o solo. Então, foram obtidas projeções de como sucederia um cenário de em cada condição de liberação em estudo.

Comparativamente aos dados reportados na literatura e ferramentas de estimativa de classificação de área e análise de risco (EFFECTS e Quadvent), percebeu-se uma proximidade nos resultados simulados quando avaliado para concentrações maiores. Porém, para concentrações menores houveram

disparidades de resultados, apontando para as limitações dos softwares e também formas de cálculos diferentes da metodologia empregada neste trabalho.

Por meio das análises de sensibilidades desenvolvidas, avaliou-se a influência de cada parâmetro de análise e percebeu-se perfis similares aos obtidos em uma liberação de jato de gás, com exceção de parte do perfil de velocidade do vento, o que está associado as características da liberação em cada estudo. Notou-se por meio da análise de sensibilidade que o diâmetro do orifício de liberação, a velocidade do vento e altura da fonte consistem nos fatores de maior influência nos resultados de extensão e volume da pluma quando comparados aos demais parâmetros.

O efeito do solo juntamente com a altura da fonte e a velocidade do vento também constituíram parâmetros importantes no presente estudo. Foi possível notar que o solo e a variação da altura possuem um efeito considerável na descontinuidade do comportamento dos perfis de extensão e volume de cada parâmetro analisado. Seja deslocando os perfis de alguns parâmetros para cima no gráfico, indicando valores de extensão e volume maiores conforme se aproximam do solo, seja na ação conjunta da altura de fonte, solo e velocidade do vento ao visualizar o espalhamento ou afilamento da pluma, até mesmo a inversão da pluma ou seu acúmulo ao redor do ponto de emissão.

Com relação a velocidade do vento percebeu-se que os ventos mais brandos são os que geram maiores volumes de pluma, e que o aumento da velocidade do vento no sentido oposto a liberação, até aproximadamente -1 m/s, implicou no aumento dos valores de extensão da pluma. Notou-se, também, o ponto de inversão da pluma para velocidades de vento no sentido contrário ao jato, e uma vez invertida a pluma, esta cresce por trás do orifício podendo se espalhar lateralmente pelo solo, como também podem convergir no eixo de simetria.

A classificação de área realizada para todos os casos da análise de sensibilidade apontou, em sua maioria, para o tipo de Zona 2 devido às características do cenário de liberação. Porém, percebeu-se que a norma não leva em consideração fatores importantes no cenário de classificação, a exemplo

da altura da fonte e, conseqüentemente, o efeito do solo, como também a direção da velocidade do vento. Conforme mencionado, tais fatores possuem um efeito significativo na extensão e volume de uma pluma bifásica. Vale pontuar também a incerteza existente na escolha da reta referente ao tipo de liberação na determinação da extensão da área classificada. Não existe um detalhamento acurado o suficiente para decidir o tipo de reta sem que se conheça bem o fenômeno e comportamento previsto que uma dada liberação possui. As extensões obtidas pela norma se apresentaram em sua maioria maiores que as obtidas em CFD, exceto no caso do fluxo em equilíbrio com diâmetros maiores e para a velocidade do vento de -2 m/s.

7.2 SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS

Para aperfeiçoar e expandir a compreensão acerca das liberações bifásicas, algumas sugestões de trabalhos futuros podem ser elencadas.

Simular a liberação bifásica de outros componentes puros e também simulações bifásicas multicomponentes a fim de expandir a compreensão acerca do fenômeno, além de aumentar a base de dados, aperfeiçoando a estimativa do perfil de comportamento de extensão e volume para fins de classificação de área.

Simular outros cenários de liberação bifásica como a formação de poças resultantes de liberações bifásicas, e a presença de obstáculos no cenário de liberação bifásica, e, assim, avaliar o efeito no comportamento da pluma, e, conseqüentemente, na extensão e volume.

Obter um modelo matemático que estime a extensão e o volume de pluma de uma liberação bifásica em função dos parâmetros avaliados neste trabalho e em função da substância liberada.

Estimar o grau de diluição de forma numérica mediante a posição da fonte em relação ao solo, e frente a velocidade de ventilação, trazendo para o cálculo do volume hipotético.

REFERÊNCIAS

ABNT NBR IEC 60079-10-1/Ed2. Atmosferas explosivas – Parte 10-1: Classificação de áreas – Atmosferas explosivas de gás, 2019.

ALMEIDA, Natalya A. B.; BARROS, Paloma L.; ALVES, José J. N. CFD simulation of wind effect on the flammable gas cloud formation from two-phase release. Annual Meeting AIChE, Boston, 2021.

ANJOS, Deborah A. Desenvolvimento e aperfeiçoamento de modelos matemáticos na previsão de liberações bifásicas em atmosferas explosivas. Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2021.

BARROS, Paloma L.; NASCIMENTO, Claudemi A.; FREIRE, Ranny R.; QUEIROZ, Francisco J.; NETO, Antônio T.; ALVES, José J. N. Numerical simulation of choked two-phase flow for hazardous area classification. XL CILAMCE, Natal – RN, novembro, 2019.

BARROS, Paloma L.; LUIZ, Aurélio M.; NASCIMENTO, Claudemi A.; NETO, Antônio T. P.; ALVES, José J. N. On non-monotonic wind influence on flammable gas cloud from CFD simulations for hazardous area classification. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 68, 2020.

BARROS, Paloma L. Engineering applications of typical non-reacting flows using computational fluid dynamics. Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2020.

BÉRNARD, Pierre; HOURRI, Ahmed; ANGERS, Benjamin; TCHOUVELEV, Andrei. Adjacent surface effect on the flammable cloud of hydrogen and methane jets: numerical investigation and engineering correlations. International Journal of Hydrogen Energy 41, pp.18654-18662, 2016.

BRITTER, R; WEIL, J.; LEUNG, J; HANNA, S. Toxic industrial chemical (TIC) source emissions modeling for pressurized liquefied gases. Atmospheric Environment, pp. 1-25, 2011.

CALAY, R. K.; HOLDO, A. E. Modelling the dispersion of flashing jets using CFD. *Journal of Hazardous Materials*, pp. 1198-1209, 2008.

CENTER FOR CHEMICAL PROCESS SAFETY (CCPS), *Guidelines for Postrelease Mitigation Technology in the Chemical Process Industry*. American Institute of Chemical Engineers, New York, 1997.

COLDRICK, Simon. Modeling small-scale flashing propane jets. *Chemical Engineering Transactions*, AIDIC – The Italian Association of Chemical Engineering, Vol. 48, pp. 73-78, 2016.

COX A. W.; LEES, F. P.; ANG, M. L. C. *Classification of hazardous locations*. Rugby, IChemE, 1990.

CROWL, Daniel A.; LOUVAR, Joseph F. *Chemical Process Safety: Fundamentals with applications*. 3rd ed., Prentice Hall, 2011.

CUCULEANU, Vasile; LUPU, Alexandru; GRIGORAS, Georgiana; POPESCU, Ion; TOMA, Alexandru. Dispersion model form low wind and atmospheric calm, part I: Description. *Romanian Reports in Physics*, 2019.

FAUSKE, Hans K. Flashing Flows or some practical guidelines for emergency releases. *Plant/Operations Progress*, vol. 4, N^o 3, Julho, 1985.

HANNA, Steven R.; BRITTER, Rex E. Wind flow and vapor cloud dispersion at industrial and urban sites. Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers (AIChE), 140pp, 2002.

HOURRI, A.; ANGERS, B.; BÉNARD, P. Surface effects on flammable extent of hydrogen and methane jets. *International Journal of Hydrogen Energy* 34, pp. 1569-1577, 2009.

IEC 60079-10-1/Ed2. *Explosive Atmospheres – Part 10-1: Classification of Areas – Explosive Gas Atmospheres*, 2020.

ICHARD, Mathieu. Numerical computations of pressurized liquefied gas releases into the atmosphere. Tese apresentada ao Departamento de Física e Tecnologia pela Universidade de Bergen. Bergen, Noruega, 2012.

INTERNATIONAL LABOUR ORGANIZATION. Agência tripartida da Organização das Nações Unidas, 2004. Disponível em: <https://www.ilo.org/legacy/english/protection/safework/cis/products/safetytm/main.htm> . Acesso em: 22 de jul. 2021.

IVINGS, M. J.; CLARKE, S.; GANT, S. E.; FLATCHER, B.; HEATHER, A.; POCOCK, D. J.; PRITCHARD, D. K.; SANTON, R.; SAUNDERS, C. J. Area classification for secondary releases from low pressure natural gas systems. Health and Safety Laboratory, HSE Books, UK, 2008.

IVINGS, M. J.; KELSEY, A. Technical input on ventilation effectiveness for area classification guidance EI15. Health and Safety Laboratory, HSE Books, UK, 2014.

JAIN, M.; PRAKASH, R. S.; TOMAR, G.; RAVIKRISHNA, R. V. Secondary breakup of a drop at moderate Weber numbers. The Royal Society, 2015.

KAISER, G. D. A Review of Models for Predicting the Dispersion of Ammonia in the Atmosphere. Plant/Operations Progress, Vol. 8, N^o1, p 58-64, 1989.

KAY, Peter J.; BOWEN, Phillip J.; WITLOX, Henk W. M. (2010), "Sub-cooled and flashing liquid jets and droplet dispersion II. Scaled experiments and derivation of droplet size correlations", Journal of Loss Prevention in the Process Industries 23, pp.849-856.

LACOME, J. M.; LEMOFACK, C.; REVEILLON, J.; DEMOULLIN, F. X. Numerical modelling of flashing liquid jets due to leakage of liquefied gas storage. 43. ESReDA Seminar on Land Use Planning and Risk-Informed Decision Making "Aménagement du Territoire et Prise Décision en Maîtrise des Risques", França, ineris-00973690, Abril, 2014.

LACOME, J. M.; LEMOFACK, C.; JAMOIS, D.; REVEILLON, J.; DURET, B.; DEMOULLIN, F. X. Experimental data and numerical modeling of flashing jets of pressure liquefied gases. Process Safety Progress, American Institute of Chemical Engineers. Março, 2020.

LIU, Z.; REITZ, R. D. An analysis of the distortion and breakup mechanisms of high speed liquid drops. *Int. J. Multiphase Flow*, Elsevier Science, V. 23, Nº4, pp. 631-650, 1997.

MANNAN, S.; LEES, F. P. *Lees' Loss Prevention in the Process Industries: Hazard Identification, Assessment, and Control*, 3 ed. V. 1. Amsterdam, Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005.

MENTER, F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA Journal*, Vol. 32, Nº 8, agosto, 1994.

NASCIMENTO, C. A.; LUIZ, A. M.; BARROS, P. L.; NETO, A. T. P.; ALVES, J. J. N. A CFD-based empirical model for hazardous area extent prediction including wind effects. *Journal of loss prevention in the process industries*, v. 71, n. 104497, p. 104497, 2021.

OLIVEIRA, T. C. L. *Contribuições para a classificação de áreas devido a liberação bifásica via fluidodinâmica computacional*. Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2018.

POLANCO, Geanette; HOLDO, Arne E.; MUNDAY, George. General review of flashing jet studies. *Journal of Hazardous Materials*, 173, pp. 2-18, 2010.

PONTIGGIA, M.; DERUDI, M.; BUSINI, V.; ROTA, R. Hazardous gas dispersion: A CFD model accounting for atmospheric stability classes. *Journal of Hazardous Materials*, 171, pp. 739-747, 2009.

RAJ, Phani K.; MORRIS, John A. *Source characterization and heavy gas dispersion models for reactive chemicals*. Vol 1, 1986.

SALAZAR, Márcio P. *Estudo sobre a modelagem da dispersão atmosférica de gases densos decorrente de liberações acidentais em análise quantitativa de risco*. Dissertação apresentada Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2016.

SOUZA, A. O. *Estudo e inovação em classificação de áreas de atmosfera explosiva via fluidodinâmica computacional*. Tese apresentada ao Programa de

Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2016.

TOMMASINI, Riccardo. The classification of hazardous areas where explosive gas atmospheres may be present. *Safety Science*, 58, pp. 53-58, 2013.

VAN DEN BOSCH, C. J. H.; WETERINGS, R. A. P. M. Methods for the calculation of physical effects (Yellow Book). Committee for Prevention of Disasters, The Hague (NL), 3.ed., 2005.

WEBER, D. M.; IVINGS, M. J.; SANTON, R. C. Ventilation theory and dispersion modelling applied to hazardous area classification. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 24, pp. 612-621, 2011.

WIMSHURST, A. The $k - \omega$ SST Turbulence Model – Computational Fluid Dynamics Fundamentals. 2019. Disponível em: <https://www.youtube.com/watch?v=myv-ityFnS4> .

WITLOX, H. W. M.; BOWEN, P. J. Flashing liquid jets and two-phase dispersion. A Review. Prepared by Det Norske Veritas Ltd for the Health and Safety Executive, Norwich, 2002.

WITLOX, Henk W. M.; HARPER, Mike; OKE, Adeyemi; BOWEN, Phill J.; KAY, Peter; JAMOIS, Didier; PROUST, Christophe. Two-phase jet releases and droplet dispersion: scaled and large-scale experiments droplet-size correlation development and model validation”, Symposium Series N° 155, Hazards XXI, IChemE, pp.615-623, 2009.

ANEXO

PARÂMETROS DE LIBERAÇÃO E RESULTADOS PARA A CONDIÇÃO DE EQUILÍBRIO TERMODINÂMICO NO ORIFÍCIO DE LIBERAÇÃO

Tabela I.1 – Valores de entrada no pós-expansão variando a pressão de armazenamento.

Nº da simulação	Pressão de armazenamento (bar)	Valores dos parâmetros de entrada no pós-expansão					
		Fluxo mássico (kg.s-1)	Temperatura (K)	Velocidade do fluxo (m.s-1)	Diâmetro expandido (mm)	Fração de líquido	Diâmetro de gota (μm)
1	8	0.0089	231.11	122.0174	4	0.5974	74.5466
2	9.2	0.0097	231.11	131.4558	4.3	0.5410	74.0537
3	10.4	0.0104	231.11	140.2209	4.6	0.4852	73.6049
4	11.6	0.011	231.11	148.5541	4.8	0.4294	73.1909
5	12.8	0.0116	231.11	156.5459	5.1	0.3734	72.8054
6	14	0.0122	231.11	164.2791	5.3	0.3166	72.4435
7	15.2	0.0127	231.11	171.8118	5.5	0.2589	72.1017
8	16.4	0.0132	231.11	179.1503	5.7	0.1999	71.7771
9	17.6	0.0137	231.11	186.3767	5.9	0.1393	71.4674
10	18.8	0.0141	231.11	193.4525	6.1	0.0768	71.1715
11	20	0.0146	231.11	200.5496	6.3	0.0119	70.8857

Tabela I. 2 - Resultados de extensão dada a variação da pressão de armazenamento, avaliados nas três alturas do orifício de liberação definidas (0.5, 1.0 e 2.0 m) e na condição de jato livre.

Nº da simulação	Pressão de armazenamento (bar)	Casos – Orifício a 0.5 m do solo			Casos – Orifício a 1.0 m do solo			Casos – Orifício a 2.0 m do solo			Casos – Jato Livre		
		Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
1	8	1.266	2.465	6.594	1.226	2.404	4.809	1.221	2.39	4.617	1.232	2.440	4.769
2	9.2	1.268	2.479	6.763	1.227	2.406	4.786	1.226	2.402	4.671	1.243	2.459	4.826
3	10.4	1.268	2.493	6.966	1.216	2.41	4.803	1.243	2.441	4.751	1.595	2.477	4.872
4	11.6	1.27	2.493	7.067	1.218	2.416	4.79	1.217	2.403	4.724	1.243	2.464	4.872
5	12.8	1.283	2.52	7.287	1.236	2.448	4.842	1.228	2.429	4.777	1.248	2.472	4.906
6	14	1.283	2.522	7.41	1.263	2.473	4.859	1.234	2.419	4.768	1.243	2.475	4.890
7	15.2	1.282	2.516	7.523	1.232	2.44	4.827	1.237	2.419	4.766	1.248	2.486	4.912
8	16.4	1.284	2.514	7.645	1.246	2.449	4.819	1.24	2.417	4.773	1.235	2.467	4.862
9	17.6	1.285	2.511	7.764	1.259	2.465	4.831	1.245	2.425	4.761	1.245	2.481	4.882
10	18.8	1.288	2.51	7.891	1.24	2.436	4.811	1.227	2.408	4.752	1.242	2.473	4.811
11	20	1.291	2.508	8.017	1.238	2.429	4.799	1.236	2.423	4.765	1.242	2.478	4.873

Tabela I. 3 - Resultados de volume dada a variação da pressão de armazenamento, avaliados nas três alturas do orifício de liberação definidas (0.5, 1.0 e 2.0 m) e na condição de jato livre.

Nº da simulação	Pressão de armazenamento (bar)	Casos – Orifício a 0.5 m do solo			Casos – Orifício a 1.0 m do solo			Casos – Orifício a 2.0 m do solo			Casos – Jato Livre		
		Volume CFD (m³)			Volume CFD (m³)			Volume CFD (m³)			Volume CFD (m³)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	LEL	LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
1	8	0.014	0.123	1.479	0.015	0.122	0.974	0.015	0.119	0.932	0.015	0.126	0.986
2	9.2	0.015	0.127	1.531	0.015	0.123	0.989	0.015	0.123	0.959	0.015	0.130	1.013
3	10.4	0.015	0.13	1.588	0.016	0.127	1.013	0.016	0.126	0.998	0.016	0.133	1.041
4	11.6	0.015	0.127	1.585	0.016	0.127	0.993	0.016	0.124	0.976	0.016	0.132	1.027
5	12.8	0.016	0.132	1.656	0.016	0.13	1.018	0.016	0.13	1.016	0.016	0.136	1.059
6	14	0.016	0.135	1.680	0.016	0.13	1.026	0.016	0.126	1.016	0.017	0.135	1.046
7	15.2	0.016	0.132	1.695	0.016	0.129	1.023	0.016	0.127	1.005	0.017	0.135	1.053
8	16.4	0.016	0.133	1.705	0.017	0.128	1.011	0.016	0.129	0.992	0.017	0.134	1.037
9	17.6	0.017	0.132	1.706	0.017	0.128	1.011	0.016	0.127	0.992	0.017	0.134	1.035
10	18.8	0.017	0.131	1.718	0.017	0.127	1.000	0.016	0.126	0.991	0.017	0.135	1.033
11	20	0.017	0.133	1.714	0.017	0.127	0.992	0.017	0.127	0.992	0.017	0.134	1.032

Tabela I.4 – Valores de entrada no pós-expansão variando o diâmetro do orifício de liberação.

Nº da simulação	Diâmetro de orifício (mm)	Valores dos parâmetros de entrada no pós-expansão					
		Fluxo mássico (kg.s-1)	Temperatura (K)	Velocidade do fluxo (m.s-1)	Diâmetro expandido (mm)	Fração de líquido	Diâmetro de gota (μm)
12	0.1	0.0001	231.11	164.2791	0.4	0.3166	22.6685
13	0.34	0.0008	231.11	164.2791	1.4	0.3166	54.0017
14	0.58	0.0024	231.11	164.2791	2.4	0.3166	72.5199
15	0.82	0.0048	231.11	164.2791	3.3	0.3166	72.486
16	1.06	0.0081	231.11	164.2791	4.3	0.3166	72.462
17	1.3	0.0122	231.11	164.2791	5.3	0.3166	72.4435
18	1.54	0.0171	231.11	164.2791	6.2	0.3166	72.4286
19	1.78	0.0229	231.11	164.2791	7.2	0.3166	72.4161
20	2.02	0.0294	231.11	164.2791	8.2	0.3166	72.4054
21	2.26	0.0368	231.11	164.2791	9.2	0.3166	72.3961
22	2.5	0.0451	231.11	164.2791	10.1	0.3166	72.3878

Tabela I. 5 - Resultados de extensão dada a variação do diâmetro de orifício, avaliados nas três alturas do orifício definidas (0.5, 1.0 e 2.0 m) e na condição de jato livre.

Nº da simulação	Diâmetro de orifício (mm)	Casos – Orifício a 0.5 m do solo			Casos – Orifício a 1.0 m do solo			Casos – Orifício a 2.0 m do solo			Casos – Jato Livre		
		Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
12	0.1	0.106	0.208	0.410	0.073	0.168	0.361	0.116	0.214	0.412	0.114	0.216	0.420
13	0.34	0.351	0.679	1.336	0.298	0.594	1.238	0.349	0.671	1.306	0.356	0.687	1.341
14	0.58	0.589	1.156	2.274	0.515	1.066	2.150	0.590	1.141	2.212	0.594	1.159	2.272
15	0.82	0.809	1.586	3.367	0.736	1.488	3.013	0.807	1.556	3.019	0.793	1.573	3.115
16	1.06	1.049	2.055	6.240	0.994	1.977	3.924	1.042	2.010	3.926	1.021	2.039	4.028
17	1.3	1.288	2.523	7.759	1.245	2.461	4.840	1.276	2.457	4.809	1.243	2.475	4.890
18	1.54	1.506	3.021	9.049	1.435	2.868	5.836	1.487	2.879	5.674	1.474	2.932	5.739
19	1.78	1.725	3.815	10.522	1.672	3.311	8.615	1.711	3.293	6.594	1.691	3.374	6.574
20	2.02	1.966	5.905	12.183	1.906	3.761	10.477	1.944	3.772	7.553	1.918	3.819	7.406
21	2.26	2.210	7.013	14.012	2.153	4.217	11.901	2.171	4.220	8.533	2.155	4.282	8.234
22	2.5	2.430	7.852	15.836	2.373	4.645	13.067	2.385	4.628	9.494	2.352	4.681	9.030

Tabela I. 6 - Resultados de volume dada a variação do diâmetro de orifício, avaliados nas três alturas do orifício definidas (0.5, 1.0 e 2.0 m) e na condição de jato livre.

Nº da simulação	Diâmetro de orifício (mm)	Casos – Orifício a 0.5 m do solo			Casos – Orifício a 1.0 m do solo			Casos – Orifício a 2.0 m do solo			Casos – Jato Livre		
		Volume CFD (m ³)			Volume CFD (m ³)			Volume CFD (m ³)			Volume CFD (m ³)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
12	0.1	9.14E-06	7.21E-05	5.65E-04	1.35E-05	9.66E-05	6.50E-04	9.07E-06	7.18E-05	5.69E-04	8.91E-06	7.33E-05	5.82E-04
13	0.34	2.97E-04	2.42E-03	0.019	2.86E-04	2.48E-03	0.018	3.04E-04	2.45E-03	0.019	3.00E-04	2.47E-03	0.020
14	0.58	1.52E-03	0.012	0.099	1.56E-03	0.012	0.092	1.54E-03	0.012	0.094	1.51E-03	0.012	0.101
15	0.82	4.02E-03	0.033	0.272	4.14E-03	0.032	0.249	4.03E-03	0.032	0.245	4.03E-03	0.033	0.264
16	1.06	8.81E-03	0.072	0.894	9.06E-03	0.071	0.545	8.82E-03	0.070	0.546	8.92E-03	0.073	0.576
17	1.3	0.016	0.134	1.761	0.017	0.132	1.009	0.016	0.128	1.021	0.017	0.135	1.046
18	1.54	0.027	0.217	2.768	0.026	0.207	1.675	0.026	0.206	1.622	0.027	0.218	1.685
19	1.78	0.041	0.361	4.235	0.041	0.319	3.160	0.040	0.320	2.596	0.042	0.336	2.598
20	2.02	0.061	0.685	6.216	0.060	0.469	5.477	0.059	0.471	3.881	0.061	0.492	3.762
21	2.26	0.087	1.113	8.886	0.085	0.656	8.139	0.082	0.662	5.464	0.086	0.684	5.209
22	2.5	0.113	1.558	12.593	0.113	0.874	10.919	0.109	0.873	7.435	0.115	0.903	6.858

Tabela I.7 – Variação da velocidade do vento, sendo os valores das demais variáveis a observada no ponto médio.

Nº da simulação	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37
Velocidade do vento (m/s)	-5	-4	-3	-2	-1.5	-1	-0.5	0	0.5	1	1.5	2	3	4	5

Tabela I. 8 - Resultados de extensão dada a variação da velocidade do vento, para o orifício localizado a 2.0m de altura do solo e na condição de jato livre.

Nº da simulação	Velocidade do vento (m/s)	Casos – Orifício a 2.0 m do solo			Casos – Jato Livre		
		Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
23	-5	0.923	0.954	0.972	0.870	0.898	0.915
24	-4	1.134	1.186	1.212	1.121	1.171	1.197
25	-3	1.438	1.560	1.603	1.417	1.528	1.669
26	-2	1.460	2.238	2.343	1.475	2.135	2.229
27	-1.5	1.389	2.693	2.892	1.409	2.541	2.701
28	-1	1.290	2.631	4.951	1.293	2.666	3.405
29	-0.5	1.248	2.497	4.942	1.243	2.478	4.882
30	0	1.243	2.477	4.890	1.243	2.475	4.890
31	0.5	1.239	2.650	4.853	1.245	2.475	4.863
32	1	1.263	2.477	4.897	1.245	2.481	4.929
33	1.5	1.244	2.492	4.991	1.249	2.499	4.991
34	2	1.250	2.506	5.023	1.255	2.517	5.031
35	3	1.265	2.532	5.050	1.270	2.556	5.068
36	4	1.282	2.555	4.969	1.288	2.580	5.015
37	5	1.301	2.561	4.828	1.308	2.582	4.869

Tabela I. 9 - Resultados de volume dada a variação da velocidade do vento, para o orifício localizado a 2.0m de altura do solo.

Nº da simulação	Velocidade do vento (m/s)	Casos – Orifício a 2.0 m do solo			Casos – Jato Livre		
		Volume CFD (m³)			Volume CFD (m³)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
23	-5	0.032	0.097	0.265	0.031	0.087	0.242
24	-4	0.037	0.140	0.365	0.038	0.138	0.359
25	-3	0.037	0.215	0.592	0.038	0.210	0.568
26	-2	0.031	0.309	1.205	0.031	0.306	1.099
27	-1.5	0.027	0.330	1.785	0.027	0.326	1.513
28	-1	0.019	0.190	2.633	0.020	0.214	1.690

(Continua...)

Tabela I. 9 (Continuação...)

Nº da simulação	Velocidade do vento (m/s)	Casos – Orifício a 2.0 m do solo			Casos – Jato Livre		
		Volume CFD (m ³)			Volume CFD (m ³)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
29	-0.5	0.017	0.140	1.101	0.017	0.135	1.052
30	0	0.017	0.135	1.040	0.017	0.135	1.046
31	0.5	0.015	0.116	0.783	0.015	0.116	0.784
32	1	0.014	0.102	0.644	0.014	0.103	0.641
33	1.5	0.013	0.092	0.543	0.013	0.094	0.546
34	2	0.013	0.085	0.478	0.013	0.085	0.478
35	3	0.012	0.073	0.381	0.012	0.074	0.384
36	4	0.011	0.065	0.315	0.011	0.065	0.315
37	5	0.010	0.057	0.262	0.010	0.058	0.263

Tabela I.10 – Variação da altura do orifício ao solo, sendo os valores das demais variáveis a observada no ponto médio.

Nº da simulação	Altura do orifício ao solo (m)	Extensão CFD (m)			Volume CFD (m ³)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
38	0.25	1.214	4.878	10.626	0.015	0.243	2.407
39	0.5	1.352	2.503	8.439	0.016	0.134	1.844
40	0.75	1.253	2.499	5.288	0.016	0.134	1.109
41	1	1.249	2.482	4.950	0.017	0.135	1.046
42	1.25	1.241	2.471	4.884	0.016	0.134	1.040
43	1.5	1.252	2.496	4.919	0.017	0.136	1.042
44	1.75	1.244	2.482	4.893	0.016	0.135	1.043
45	2	1.243	2.477	4.890	0.017	0.135	1.040

PARÂMETROS DE LIBERAÇÃO E RESULTADOS PARA A CONDIÇÃO DE NÃO-EQUILÍBRIO NO ORIFÍCIO DE LIBERAÇÃO

Tabela I.11 – Valores de entrada no pós-expansão variando a pressão de armazenamento.

Nº da simulação	Pressão de armazenamento (bar)	Valores dos parâmetros de entrada no pós-expansão					
		Fluxo mássico (kg.s-1)	Temperatura (K)	Velocidade do fluxo (m.s-1)	Diâmetro expandido (mm)	Fração de líquido	Diâmetro de gota (μm)
1	8	0.0352	231.11	52.7148	11.6	0.6362	74.1335
2	11	0.0412	231.11	64.2836	12.7	0.5435	72.8963
3	14	0.0462	231.11	74.6520	13.5	0.4614	65.3935
4	17	0.0503	231.11	84.2895	14.2	0.3860	55.2035
5	20	0.0539	231.11	93.4684	14.7	0.3153	47.5876

Tabela I.12 - Resultados de extensão dada a variação da pressão de armazenamento, avaliados nas três alturas do orifício de liberação definidas (0.5, 1.0 e 2.0 m) e na condição de jato livre.

Nº da simulação	Pressão de armazenamento (bar)	Casos – Orifício a 0.5 m do solo			Casos – Orifício a 1.0 m do solo			Casos – Orifício a 2.0 m do solo			Casos – Jato Livre		
		Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
1	8	5.233	9.912	17.622	3.686	8.570	15.676	3.622	7.630	13.252	3.637	6.441	10.192
2	11	5.184	10.516	18.989	3.611	9.067	16.753	3.583	7.823	14.211	3.572	6.690	11.037
3	14	4.725	10.914	19.311	3.542	9.340	17.216	3.539	6.859	15.101	3.515	6.787	11.632
4	17	3.809	11.334	20.211	3.489	9.488	17.589	3.493	6.755	15.645	3.441	6.806	12.048
5	20	3.610	11.590	20.843	3.440	9.491	17.860	3.440	6.693	16.180	3.413	6.776	12.233

Tabela I.13 - Resultados de volume dada a variação da pressão de armazenamento, avaliados nas três alturas do orifício de liberação definidas (0.5, 1.0 e 2.0 m) e na condição de jato livre.

Nº da simulação	Pressão de armazenamento (bar)	Casos – Orifício a 0.5 m do solo			Casos – Orifício a 1.0 m do solo			Casos – Orifício a 2.0 m do solo			Casos – Jato Livre		
		Volume CFD (m ³)			Volume CFD (m ³)			Volume CFD (m ³)			Volume CFD (m ³)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
1	8	0.583	4.551	33.595	0.376	3.830	26.865	0.368	2.993	17.900	0.391	2.791	12.456
2	11	0.520	4.782	34.736	0.378	4.129	28.300	0.369	3.012	20.776	0.377	2.969	15.379
3	14	0.438	4.891	33.832	0.367	4.172	28.498	0.366	2.804	23.258	0.370	2.998	17.479
4	17	0.387	4.969	34.073	0.355	4.055	28.781	0.355	2.734	24.835	0.356	2.936	18.838
5	20	0.360	4.898	33.642	0.341	3.764	28.536	0.343	2.654	25.942	0.347	2.827	19.347

Tabela I.14 – Valores de entrada no pós-expansão variando o diâmetro do orifício de liberação.

Nº da simulação	Diâmetro de orifício (mm)	Valores dos parâmetros de entrada no pós-expansão					
		Fluxo mássico (kg.s-1)	Temperatura (K)	Velocidade do fluxo (m.s-1)	Diâmetro expandido (mm)	Fração de líquido	Diâmetro de gota (µm)
6	0.1	0.0001	231.11	164.2791	0.4	0.3166	22.6685
7	0.7	0.0008	231.11	164.2791	1.4	0.3166	54.0017
8	1.3	0.0024	231.11	164.2791	2.4	0.3166	72.5199
9	1.9	0.0048	231.11	164.2791	3.3	0.3166	72.486
10	2.5	0.0081	231.11	164.2791	4.3	0.3166	72.462

Tabela I.15 - Resultados de extensão dada a variação do diâmetro de orifício, avaliados nas três alturas do orifício definidas (0.5, 1.0 e 2.0 m).

Nº da simulação	Diâmetro de orifício (mm)	Casos – Orifício a 0.5 m do solo			Casos – Orifício a 1.0 m do solo			Casos – Orifício a 2.0 m do solo			Casos – Jato Livre		
		Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
6	0.1	0.28	0.561	1.120	0.295	0.577	1.131	1.047	1.168	1.587	0.290	0.559	1.007
7	0.7	1.915	5.565	10.725	1.941	3.815	9.243	1.939	3.752	8.171	1.920	3.722	6.668
8	1.3	4.725	10.914	19.311	3.542	9.340	17.216	3.539	6.859	15.101	3.531	6.675	11.285
9	1.9	8.531	16.386	26.879	5.257	13.962	24.031	5.110	12.222	22.295	5.124	9.600	15.763
10	2.5	11.711	21.167	34.583	9.408	18.220	31.962	6.659	16.244	33.326	7.541	11.779	17.768

Tabela I.16 - Resultados de volume dada a variação do diâmetro de orifício, avaliados nas três alturas do orifício definidas (0.5, 1.0 e 2.0 m).

Nº da simulação	Diâmetro de orifício (mm)	Casos – Orifício a 0.5 m do solo			Casos – Orifício a 1.0 m do solo			Casos – Orifício a 2.0 m do solo			Casos – Jato Livre		
		Volume CFD (m³)			Volume CFD (m³)			Volume CFD (m³)			Volume CFD (m³)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
6	0.1	1.76E-04	0.002	0.012	1.87E-04	0.002	0.012	1.87E-04	0.002	0.012	1.85E-04	1.48E-03	0.011
7	0.7	0.059	0.743	5.571	0.059	0.481	4.676	0.058	0.466	3.673	0.060	0.485	3.146
8	1.3	0.438	4.891	33.832	0.367	4.172	28.498	0.366	2.804	23.258	0.367	2.834	16.135
9	1.9	1.999	15.402	95.173	1.127	13.145	82.369	1.095	11.108	73.328	1.138	8.776	44.283
10	2.5	4.763	33.785	201.181	3.498	28.967	178.778	2.471	25.652	175.308	2.522	19.120	90.370

Tabela I.17 – Variação da velocidade do vento, sendo os valores das demais variáveis a observada no ponto médio.

Nº da simulação	11	12	13	14	15
Velocidade do vento (m/s)	-2	-1	0	1	2

Tabela I.18 - Resultados de extensão dada a variação da velocidade do vento, avaliados nas três alturas do orifício de liberação definidas (0.5, 1.0 e 2.0 m) e na condição de jato livre.

Nº da simulação	Velocidade do vento (m/s)	Casos – Orifício a 0.5 m do solo			Casos – Orifício a 1.0 m do solo			Casos – Orifício a 2.0 m do solo			Casos – Jato Livre		
		Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)			Extensão CFD (m)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
11	-2	6.531	6.674	6.715	4.357	4.936	5.012	2.604	2.700	3.079	2.550	2.646	2.941
12	-1	4.871	11.105	19.804	3.545	9.358	17.220	3.296	6.380	17.208	3.013	3.534	3.680
13	0	4.725	10.914	19.311	3.542	9.340	17.216	3.57	6.85	12.97	3.531	6.675	11.285
14	1	3.662	11.903	20.195	3.585	7.034	16.921	3.57	6.85	12.97	3.571	7.026	13.733
15	2	3.713	13.112	25.398	3.677	7.301	20.383	3.67	7.22	14.25	3.678	7.311	15.822

Tabela I.19 - Resultados de volume dada a variação da velocidade do vento, avaliados nas três alturas do orifício de liberação definidas (0.5, 1.0 e 2.0 m) e na condição de jato livre.

Nº da simulação	Velocidade do vento (m/s)	Casos – Orifício a 0.5 m do solo			Casos – Orifício a 1.0 m do solo			Casos – Orifício a 2.0 m do solo			Casos – Jato Livre		
		Volume CFD (m³)			Volume CFD (m³)			Volume CFD (m³)			Volume CFD (m³)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
11	-2	4.661	15.516	34.654	1.141	9.023	28.790	0.820	3.135	9.633	0.794	2.963	8.872
12	-1	0.456	5.073	54.399	0.367	4.209	31.384	0.485	7.069	58.965	0.421	3.652	16.779
13	0	0.438	4.891	33.832	0.367	4.172	28.498	0.366	2.804	23.258	0.367	2.834	16.135
14	1	0.284	3.241	18.869	0.276	1.715	14.613	0.277	1.686	9.368	0.282	1.757	10.607
15	2	0.230	2.230	15.490	0.227	1.273	9.151	0.228	1.254	6.405	0.233	1.321	7.889

Tabela I.20 – Variação da altura do orifício ao solo, sendo os valores das demais variáveis a observada no ponto médio.

Nº da simulação	Altura do orifício ao solo (m)	Extensão CFD (m)			Volume CFD (m ³)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
16	0.25	6.772	12.936	22.547	0.747	5.839	43.197
17	0.5	4.725	10.914	19.311	0.438	4.891	33.832
18	1	3.542	9.340	17.216	0.367	4.172	28.498
19	2	3.520	6.811	14.933	0.362	2.776	22.910
20	3	3.531	6.648	13.697	0.359	2.686	20.032
21	4	3.527	6.659	13.295	0.363	2.735	18.882
22	5	3.531	6.703	13.279	0.359	2.693	17.666
23	6	3.545	6.697	12.449	0.365	2.747	16.122
24	7	3.523	6.699	11.452	0.368	2.822	16.338

Tabela I. 21 - Mais pontos acrescentados ao range de -5 a 5 m/s da velocidade do vento para melhor compreensão do comportamento de extensão e volume da nuvem de gás formada. Casos avaliados para o orifício a 2.0 m do solo e para a condição de jato livre.

Nº da simulação	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
Velocidade do vento (m/s)	-5	-4	-3	-2	-1.75	-1.5	-1.25	-1	-0.75	-0.5	-0.25	0	0.25	0.5	0.75	1	1.25	1.5	1.75	2	3	4	5

Tabela I. 22 - Resultados de extensão e volume da nuvem de gás para os casos da Tabela I.20.

Nº da simulação	Velocidade do vento (m/s)	Casos – Orifício a 2.0 m do solo						Casos – Jato Livre					
		Extensão CFD (m)			Volume CFD (m ³)			Extensão CFD (m)			Volume CFD (m ³)		
		LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL	LEL	½ LEL	¼ LEL
1	-5	1.298	1.319	6.489	0.240	0.714	2.845	1.306	1.323	6.395	0.242	0.715	2.877
2	-4	1.590	1.619	5.560	0.353	0.972	3.587	1.589	1.618	5.322	0.352	0.968	3.569
3	-3	2.015	2.068	4.221	0.534	1.514	4.991	2.012	2.063	4.021	0.540	1.542	4.949
4	-2	2.604	2.700	3.079	0.820	3.135	9.633	2.550	2.646	2.941	0.794	2.963	8.872
5	-1.75	2.745	2.856	5.032	0.893	3.697	13.378	2.710	2.830	2.887	0.841	3.491	10.690
6	-1.5	3.151	3.279	7.677	0.914	4.555	21.849	2.851	3.002	3.075	0.805	3.998	12.846
7	-1.25	3.333	3.696	15.476	0.760	9.790	32.937	2.973	3.214	3.309	0.637	4.231	15.169
8	-1	3.296	6.380	17.208	0.485	7.069	58.965	3.013	3.534	3.680	0.421	3.652	16.779
9	-0.75	3.344	16.312	12.729	0.447	5.714	76.274	3.158	4.300	4.570	0.367	2.485	14.482
10	-0.5	3.540	6.929	15.253	0.370	2.871	25.445	3.559	5.949	7.667	0.423	3.054	14.089
11	-0.25	3.548	6.869	15.320	0.370	2.840	24.521	3.531	6.673	10.969	0.369	2.871	16.176
12	0	3.539	6.859	15.101	0.366	2.804	23.258	3.531	6.675	11.285	0.367	2.834	16.135
13	0.25	3.516	6.722	15.184	0.337	2.474	20.289	3.506	6.731	11.655	0.349	2.602	15.134
14	0.5	3.525	6.692	15.103	0.312	2.117	16.544	3.521	6.874	12.240	0.318	2.220	13.105
15	0.75	3.562	6.760	15.161	0.295	1.858	12.881	3.549	6.965	13.171	0.300	1.971	11.639
16	1	3.569	6.847	12.967	0.277	1.686	9.368	3.571	7.026	13.733	0.282	1.757	10.607
17	1.25	3.598	6.975	13.191	0.264	1.547	8.247	3.595	7.099	14.290	0.268	1.622	9.725
18	1.5	3.608	7.043	13.468	0.249	1.436	7.416	3.622	7.165	14.843	0.258	1.537	9.048
19	1.75	3.655	7.148	13.910	0.237	1.340	0.685	3.650	7.225	15.347	0.245	1.404	8.381
20	2	3.674	7.222	14.247	0.228	1.254	6.405	3.678	7.311	15.822	0.233	1.321	7.889
21	3	3.731	7.439	15.082	0.192	1.005	4.950	3.795	7.589	17.189	0.202	1.055	6.260
22	4	3.795	7.619	15.580	0.170	0.840	4.044	3.884	7.841	18.102	0.176	0.933	5.156
23	5	3.804	7.713	15.951	0.149	0.719	3.421	3.952	8.063	18.778	0.157	0.798	4.498