



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

Rodolpho Jung Silva Justino

**ESTUDO DA INFLUÊNCIA DE OBSTÁCULOS NA DISPERSÃO DE GASES
PARA CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS DE RISCO UTILIZANDO
FLUIDODIÂMICA COMPUTACIONAL**

Campina Grande – PB

2022

RODOLPHO JUNG SILVA JUSTINO

**ESTUDO DA INFLUÊNCIA DE OBSTÁCULOS NA DISPERSÃO DE GASES
PARA CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS DE RISCO UTILIZANDO
FLUIDODIÂMICA COMPUTACIONAL**

Trabalho 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

2022

J96e

Justino, Rodolpho Jung Silva.

Estudo da influência de obstáculos na dispersão de gases para classificação de áreas de risco utilizando fluidodinâmica computacional / Rodolpho Jung Silva Justino. - Campina Grande, 2022.
67 f. : il. color.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciência e Tecnologia, 2022.

"Orientação: Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves"

Referências.

1. Fluidodinâmica Computacional. 2. Classificação de Áreas. 3. Gás Inflamável. 4. Modelagem Computacional. I. Alves, José Jailson Nicácio. II. Título.

CDU 544.272(043)



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
UNIDADE ACADÊMICA DE ENGENHARIA QUÍMICA
Rua Aprígio Veloso, 882, - Bairro Universitário, 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 05 DE JULHO DE 2022

(Nº 507)

CANDIDATO(A): **Rodolpho Jung Silva Justino**. COMISSÃO EXAMINADORA: José Jailson Nicácio Alves, Prof., Dr., UFCG, **Orientador**, Heleno Bispo da Silva Junior, Prof., Dr., UFCG, Examinador Interno, e Talles Caio Linhares de Oliveira, Prof., Dr., UNINASSAU, Examinador Externo. TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: **"ESTUDO DA INFLUÊNCIA DE OBSTÁCULOS NA DISPERSÃO DE GASES PARA CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS DE RISCO UTILIZANDO FLUIDODIÂMICA COMPUTACIONAL"**. ÁREA DE CONCENTRAÇÃO Desenvolvimento de Processos Químicos. HORA DE INÍCIO: **19h:00** – 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 da Silva – Secretária do PPGEQ, os membros da Comissão Examinadora e o(a) candidato(a). Campina Grande, 05 de julho de 2022.

Maricé Pereira da Silva

Secretária

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

Orientador

Heleno Bispo da Silva Junior, Prof., Dr., UFCG
Examinador Interno

Talles Caio Linhares de Oliveira, Prof., Dr., UNINASSAU
Examinador Externo

Rodolpho Jung Silva Justino
Candidato



Documento assinado eletronicamente por **HELENO BISPO DA SILVA JUNIOR, PROFESSOR 3 GRAU**, em 05/07/2022, às 20:40, 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 05/07/2022, às 20:42, 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 **Talles Caio Linhares de Oliveira, Usuário Externo**, em 05/07/2022, às 20:42, 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 06/07/2022, às 08:00, 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 **Rodolpho Jung Silva Justino, Usuário Externo**, em 06/07/2022, às 10:40, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da [Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://sei.ufcg.edu.br/autenticidade>, informando o código verificador **2515105** e o código CRC **450F2423**.

RESUMO

Neste trabalho, o efeito do raio e distância do obstáculo de uma fonte de emissão de um jato de gás combustível pressurizado sobre a extensão e volume da pluma de gás inflamável ao longo do eixo de liberação avaliado via Fluidodinâmica Computacional (CFD). O estudo de obstáculos é objeto de interesse na classificação de áreas de risco, tendo em vista que pouco é reportado na norma internacional IEC60079-10-1:2015. Os resultados deste trabalho têm importância para estudo de classificação de áreas de risco onde atmosferas explosivas podem ser formadas, regulamentados pela norma internacional IEC60079-10-1:2015. O software ANSYS CFX 16.1 foi utilizado nas simulações, foi também observada a influência do perfil de velocidade do jato com relação à posição do obstáculo, verificou-se que caso a velocidade máxima do jato ainda não tenha sido atingida, pode ser gerado outro perfil de dispersão e influenciar ativamente na classificação de áreas de risco. Observou-se que o obstáculo quebra o momento do jato, diminuindo a diluição do com ar ambiente e, como consequência a depender das condições de distância e raio do obstáculo em questão, aumentando ou diminuindo a pluma de gás e sua extensão ao longo da superfície do obstáculo. Finalmente, foi gerado um modelo matemático para extensão e volume para as dadas concentrações, o qual pode ser futuramente utilizado como base no estudo da classificação de áreas de risco.

ABSTRACT

In this work, the effect of obstacle radius and distance from a pressurized fuel gas emission source has on the extension and volume of the flammable gas plume along the measurement axis evaluated via Computational Fluid Dynamics (CFD). The study of obstacles is an object of interest in hazardous area classification, given that little is reported in the international standard IEC60079-10-1:2015. The results of this study are important on hazardous area classification where an explosive atmosphere can be form, these classifications are regulated by the IEC6007:10-12015 standard. ANSYS CFX 16 software was used on the computational simulations. The influence of the jet velocity profile was also observed in relation to the position and radius of the obstacle, it was verified that if the maximum jet velocity has not yet been reached, another jet profile can be generated, changing the dispersion and its approach. It was observed that the obstacle breaks the moment of the jet, decreasing the dilution of the gas with ambient air and, as a consequence, depending on the conditions of distance and radius of the obstacle in question, increasing or decreasing the gas plume and its extension along the surface. of the obstacle. Finally, a mathematical model was generated for the extension and volume for the given concentrations, which can be used in the future as a basis for hazardous area classification.

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 - Etapas da definição de uma simulação no ANSYS CFX®.....	8
Figura 3.2 - Representação do domínio no Design Modeler do ANSYS®	9
Figura 3.3 - Aproximação da região do vazamento e obstáculo.....	9
Figura 3.4 - Malha numérica do domínio gerada pelo ICEM	10
Figura 3.5 - Aproximação do Obstáculo e Orifício para a Malha numérica	10
Figura 3.6 - Definição das condições de contorno do domínio de estudo	11
Figura 4.1 - Gráfico de efeitos isolados para a extensão a 3% a. Metano; b. Etano; c. CO ₂ (mol/mol).....	16
Figura 4.2 - Gráfico de Contorno de Extensão x PON x RON a. Metano; b. Etano; c. CO ₂	18
Figura 4.3 - Gráfico de efeitos isolados para o Volume a 3% a. Metano; b. Etano; c. CO ₂ ;.....	20
Figura 4.4 - Gráfico de Contorno de Volume x PON x RON a. Metano; b. Etano; c. CO ₂ ;.....	21
Figura 4.5 - Gráfico de efeitos isolados para a Extensão a 1,5% a. Metano; b. Etano; c. CO ₂ ;.....	22
Figura 4.6 - Gráfico de Contorno de Extensão x PON x RON a. Metano; b. Etano; c. CO ₂	24
Figura 4.7 - Gráfico de efeitos isolados para o Volume a 1,5% a. Metano; b. Etano; c. CO ₂ ;.....	26
Figura 4.8 - Gráfico de Contorno de Volume x PON x RON a. Metano; b. Etano; c. CO ₂	27
Figura 4.9 - Gráfico de efeitos isolados para a 1,5% a. Metano; b. Etano; c. CO ₂ ;.....	29
Figura 4.10 - Gráfico de Contorno de Extensão x PON x RON a. Metano; b. Etano; c. CO ₂	30
Figura 4.11 - Gráfico de efeitos isolados para o Volume a 1,5% a. Metano; b. Etano; c. CO ₂ ;.....	32
Figura 4.12 - Gráfico de Contorno de Volume x PON x RON a. Metano; b. Etano; c. CO ₂	33
Figura 4.13 - Representação da Linha acima do obstáculo	34

Figura 4.14 - Gráfico de Velocidade versus Posição para uma simulação em CFD.....	35
Figura 4.15 - Gráfico de PON x RON x EPN a 3% a. Metano b. Etano c. CO2	37
Figura 4.16 - Gráfico de PON x RON x EPN a 1,5% a. Metano b. Etano c. CO2	39
Figura 4.17 - Gráfico de PON x RON x EPN a 0,75% a. Metano b. Etano c. CO2.....	41
Figura 4.18 - Gráfico de PON x RON xVPN a 3% a. Metano b. Etano c. CO2	43
Figura 4.19 - Coeficientes de Regressão para VPN dos diferentes gases a 0,75%	45
Figura 4.20 - Gráfico de PON x RON x VPN a 1,5% a. Metano b. Etano c. CO2	46
Figura 4.21 - Gráfico de PON x RON x VPN a 0,75% a. Metano b. Etano c. CO2.....	47
Figura 4.22 - Gráfico de PON x RON x EPN (Todos os Gases 3%)	48
Figura 4.23 - Gráfico de PON x RON x EPN (Todos os Gases 1,5%)	49
Figura 4.24 - Gráfico de PON x RON x EPN (Todos os Gases 0,75%)	50
Figura 4.25 - Gráfico de PON x RON x VPN (Todos os Gases 3%)	51
Figura 4.26 - Gráfico de PON x RON x VPN (Todos os Gases 1,5%)	51
Figura 4.27 - Gráfico de PON x RON x VPN (Todos os Gases 0,75%)	52
Figura 4.28 - Gráfico de PON x RON x EPN (Todos os Gases Corrigidos 3%)	54
Figura 4.29 - Gráfico de PON x RON x EPN (Todos os Gases Corrigidos 1,5%)	54
Figura 4.30 - Gráfico de PON x RON x EPN (Todos os Gases Corrigidos 0,75%).....	55
Figura 4.31 - Gráfico de PON x RON x VPN (Todos os Gases Corrigidos 3%)	56
Figura 4.32 - Gráfico de PON x RON x VPN (Todos os Gases Corrigidos 1,5%)	56
Figura 4.33 - Gráfico de PON x RON x VPN (Todos os Gases Corrigidos 0,75%).....	57
Figura 4.34 - Gráfico de PON x RON x EPC - Modelo e os diferentes gases a. 3% b. 1,5% c. 0,75%	59
Figura 4.35 - Gráfico de PON x RON x VPC - Modelo e os diferentes gases a. 3% b. 1,5% c. 0,75%	61

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 - Informações sobre a malha numérica do caso de estudo	10
Tabela 3.2 - Definição do Design de Experimentos no Estudo	13
Tabela 3.3 - Informações sobre os gases Utilizados.....	14
Tabela 4.1 - Coeficientes de Regressão para EPN dos diferentes gases a 3%36	
Tabela 4.2 - Coeficientes de Regressão para EPN dos diferentes gases a 1,5%	38
Tabela 4.3 - Coeficientes de Regressão para EPN dos diferentes gases a 0,75%.....	40
Tabela 4.4 - Coeficientes de Regressão para VPN dos diferentes gases a 3%42	
Tabela 4.5 - Coeficientes de Regressão para VPN dos diferentes gases a 1,5%	44
Tabela 4.6 - Coeficientes de Regressão para EPC do modelo proposto às diferentes concentrações	58
Tabela 4.7 - Diferenças médias entre o modelo e as curvas para a Extensão. 58	
Tabela 4.8 - Coeficientes de Regressão para VPC do modelo proposto às diferentes concentrações	60
Tabela 4.9 - Diferenças médias entre o modelo e as curvas para o Volume ...	60
Tabela 4.10 - Coeficientes de Regressão para o Gás Metano.....	62
Tabela 4.11 - Coeficientes de Regressão para o Gás Etano	62
Tabela 4.12 - Coeficientes de Regressão para o Gás Carbônico	62
Tabela 4.13 - Coeficientes de Regressão para o Modelo Proposto	63

LISTA DE ABREVIATURAS

IEC	International Electrotechnical Commission
CFD	Fluidodinâmica Computacional
LENP	Laboratório de Experimentação Numérica de Processos
DOE	Design de Experimentos
PON	Posição do Obstáculo Normalizada
RON	Raio do Obstáculo Normalizado
EPN	Extensão da Pluma Normalizada
VPN	Volume da Pluma Normalizado
LEL	Limite Inferior de Inflamabilidade
DC	Distância Característica
Vol	Volume
Ext	Extensão

LISTA DE SÍMBOLOS

ρ	Massa Específica
h_{tot}	Entalpia total
t	Tempo
\mathbf{U}	Velocidade
λ	Condutividade Térmica
∇T	Varição de Temperatura
τ	Tensor de Velocidade
S_M	Termo Fonte de Momento
S_E	Termo Fonte de Energia
p	Pressão
V_0	Volume da Pluma de Jato Livre
V_i	Volume da Pluma com Obstáculo
E_0	Extensão da Pluma de Jato Livre
E_i	Extensão da Pluma com Obstáculo
X_{obst}	Posição do Obstáculo
r_{obst}	Raio do Obstáculo
DC_0	Distância Característica da Pluma de Jato Livre
GC_G	Grandeza Corrigida do Gás
FC_G	Fator de Correção do Gás
GPN_G	Grandeza da Pluma Normalizada
GPN_R	Grandeza da Pluma Normalizada de Referência

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
1.1. OBJETIVOS	2
2. Revisão Bibliográfica	3
2.1. Classificação de Áreas de Risco e Fluidodinâmica Computacional.....	3
2.2. Estado Atual da Arte	5
3. MATERIAIS E MÉTODOS.....	7
3.1. Fluidodinâmica Computacional.....	7
3.2. PRÉ PROCESSAMENTO.....	8
3.2.1. Geração da Geometria	8
3.2.2. Geração da Malha Numérica	9
3.2.3. Definição das Condições de Contorno.....	10
3.2.4. Definição da Simulação e de Grandezas	11
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	15
4.1. Design de Experimentos (DOE).....	15
4.1.1. Análise de DOE e Visualização de Resultados	15
4.1.2. Análise de Velocidade, Dispersão e o Efeito Trampolim	34
4.2. Regressões Matemáticas e Modelagem.....	35
4.2.1. Extensão	36
4.2.1. Volume.....	42
4.2.2. Combinação de Gases	48
4.3. Fator de correção por Componente.....	52
4.3.1. Combinação dos Gases com Valores Corrigidos.....	53
4.4. Modelo Proposto.....	57
4.4.1. Extensão.....	58
4.4.2. Volume.....	60

4.5. Apanhado de Regressões Numéricas	62
5. CONCLUSÕES	64
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	65

1. INTRODUÇÃO

O presente estudo, fruto de um projeto colaborativo entre o Laboratório de Experimentação Numérica de Processos (LENP) localizado em Campina Grande (PB) e a Petrobrás, localizada no Rio de Janeiro (RJ), que visa o desenvolvimento de um *software* para a Classificação de Áreas de Risco para a Indústria. O trabalho tem como finalidade apresentar uma forma prática de serem retiradas extensão e volumes de uma área classificada com presença de obstáculos para que seja parâmetro de cálculos internos no programa em questão.

O seguinte estudo tem como intuito apresentar como volume e extensão de uma pluma de gás variam ao atingirem um obstáculo retangular centrado no eixo de liberação por meio da fluidodinâmica computacional. Foram utilizadas ferramentas computacionais como *softwares* de simulação, estatísticos e matemáticos para realizarem-se as regressões numéricas e, espera-se que ao fim do mesmo seja possível descrever por meio de relações matemáticas como ocorre o fenômeno..

Quando é realizada a classificação de áreas perigosas para o trabalho de substâncias inflamáveis, é necessária a utilização de equipamentos especiais (denominados EX), a aquisição e utilização desses equipamentos faz com que o custo de operação e implantação seja elevado. Ainda, é necessário que haja distanciamento de equipamentos comuns não EX das fontes de liberação assim como uma demarcação bem definida da área classificada. Sendo assim, é de suma importância a certificação do correto dimensionamento e estudo da área classificada.

Tendo em vista a regulamentação internacional IEC 60079-10-1-2015 para classificações de áreas de risco, observa-se que a dispersão de gases com a presença de obstáculo é pouco detalhada, sendo sugerido então o estudo mais aprofundado com o auxílio da fluidodinâmica computacional para que sejam observadas tais relações. A norma menciona que a presença de obstáculos pode aumentar ou diminuir a extensão da área classificada a depender também da presença ou não de ventilação no ambiente, entretanto não há o aprofundamento sobre as situações.

Tem-se a necessidade de entender como é dada a interação entre o vazamento de um gás e um obstáculo sólido e tal interação pode ser importante para o estudo da classificação de áreas de risco e mudar como é feita a avaliação do cenário. Obstáculos podem influenciar aumentando ou diminuindo a extensão da área classificada e, é importante que seja entendido o fenômeno para que sejam feitas adequadamente as classificações. Ao subdimensionar uma área classificada, pode-se, equivocadamente não classificar uma região que ainda é em prática dada como perigosa, gerando um risco de segurança. De maneira análoga, ao superdimensionar uma área classificada, abre-se a possibilidade de que seja necessária da compra de equipamentos EX, ou mudança de *layout* para

uma região que não seria necessária tal ação, gerando problemas de custos adicionais.

O presente trabalho também verifica como as condições de posicionamento de obstáculo e perfil de velocidade podem influenciar na dispersão da pluma e quais as possíveis justificativas para que o fenômeno ocorra.

1.1. OBJETIVOS

1.1.1. Objetivo Geral

Avaliar e Desenvolver relações matemáticas que sejam capazes de descrever a influência do obstáculo em dispersões gasosas a partir de simulações computacionais.

1.1.2. Objetivos Específicos

- Analisar a influência da distância do obstáculo na extensão e volume de uma pluma de gás;
- Analisar a influência do raio do obstáculo na extensão e volume de uma pluma de gás;
- Estudar os perfis de diferentes gases e suas diferentes interações com obstáculos;
- Verificar a correlação entre os resultados apresentados e o que é apresentado na norma IEC - 60079-10-1-2015 quando menciona-se a influência da extensão de uma pluma gasosa ao atingir um obstáculo

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Um levantamento bibliográfico dos embasamentos e conceitos utilizados no presente trabalho são apresentados a seguir. Apresentam-se como a fluidodinâmica computacional e a Classificação de Áreas de risco se correlacionam e onde têm focado as pesquisas científicas da área dos últimos anos.

2.1. Classificação de Áreas de Risco e Fluidodinâmica Computacional

A classificação de áreas de risco é requerida em ambientes onde há a possibilidade de vazamento ou dispersão de substâncias inflamáveis e que possam causar danos materiais e pessoais na localização de estudo. O estudo da classificação de áreas perigosas é feito seguindo a regulamentação internacional IEC 60079-10-1:2015, a qual sugere o uso da fluidodinâmica computacional como uma ferramenta para auxiliar as análises e classificações, dessa forma, vários estudos têm sido feitos para integrar a utilização do CFD e classificação de áreas perigosas.

A norma internacional para classificação de áreas de risco IEC 60079-10-1:2015 sugere que os estudos e classificações de área sejam feitos com auxílio e embasamentos técnicos de simulações via CFD, entretanto, é possível que algumas análises e estudos da norma estejam sub ou superdimensionados, como observado também em outros trabalhos na literatura como Benintendi (2010) e Oliveira (2018).

Mahjoub *et al.*, (2001) estudou por meio de simulações numéricas a evolução da dispersão de um composto poluente em uma chaminé, levando em conta a presença de obstáculos para fins industriais. Confirmou-se que os obstáculos influenciam diretamente na dispersão do poluente ao nível do solo, alterando as concentrações e direções de correntes de poluentes ali presentes e desviando a nuvem de poluente em outras direções, o estudo também ajudou a avaliar possíveis regiões de concentração de poluente.

Gant *et al.*, (2005) utilizaram da fluidodinâmica computacional para verificar e estudar a validação do cálculo da extensão de plumas gasosas de gás natural presentes na norma BS EN 60079-10:2003 a baixas pressões. O estudo verificou superestimações de duas a três ordens de grandeza na norma, tendência que foi verificada ao redor do mundo também em outros estudos de diferentes autores e normas.

Tchouvelev *et al.* (2007), estudaram, por meio de CFD a liberação transiente de alta pressão de hidrogênio em direção de uma parede de 1m² de área e analisaram sob as condições de gás real e ideal por meio de diferentes equações de estado e verificaram em alguns casos uma superestimação de até

50% o volume da pluma de gás nos primeiros segundos da liberação por meio de relações de gases ideais.

Ivings *et al.*, (2008) avaliou a influência linear no volume inflamável estimado de uma pluma a partir de obstáculos em formatos de esferas e paralelepípedos e verificou superestimação nos métodos utilizados nos cálculos.

Hourri, Angers e Bénard, (2009) estudaram a influência de superfícies horizontais e verticais próximas a vazamentos de alta pressão de hidrogênio e metano, os estudos mostraram que para os dois gases, quanto mais próximos do solo, maior o impacto na máxima extensão das dispersões na linha central de liberação, em alguns casos de até 157% em comparação com os casos de jato livre.

Hourri *et al.*, (2011) também, através de ferramentas de CFD, estudaram a influência de superfícies horizontais paralelas a vazamentos de alta pressão em ambientes semi-confinados. Foi verificada, mais uma vez, a grande influência dessas superfícies nos casos analisados, apresentando aumentos de até 330% de extensão da pluma no LEL quando comparados aos casos de jato livre, devido à alta sensibilidade do fenômeno à proximidade do solo, por exemplo.

Angers, *et al.*, (2011) continuaram os estudos supracitados e verificaram novamente por meio da fluidodinâmica computacional a influência de superfícies próximas a vazamentos de alta pressão de metano e hidrogênio. Aqui, para todos os cenários estudados, quando o orifício encontra-se próximo da superfície, a extensão máxima de dispersão da pluma aumentou em média 182% para o hidrogênio e 291% para o metano quando comparados aos casos de jato livre.

Webber, Ivings e Santon (2011) estudaram a uma forma matemática de calcular, com o auxílio de CFD, o volume inflamável estimado, levando também em consideração graus de diluição e ventilação do ambiente e verificaram a superestimação da maneira utilizada na norma vigente.

Baouabe *et al.* (2012) estudou a influência da inclinação de uma chaminé assim como a altura de uma construção na velocidade e concentração de um determinado poluente se dissipa. Os autores identificaram um “impulso” na dispersão a depender da inclinação da chaminé, antes que o poluente alcançasse o solo, foi também reportada a grande importância da altura da chaminé na direção da dispersão do poluente com relação ao vento.

Busini, Lino e Rota, (2012) realizaram um estudo sobre a influência de grandes obstáculos e barreiras de mitigação na dispersão de gases pesados, como o gás natural liquefeito. No estudo, foi analisada a evaporação de uma poça de gás natural liquefeito e a interação com tanques, paredes, salas e finalmente barreiras de contenção. Observou-se a redução de até 50% da extensão final ao comparar-se com liberações em campo aberto. Também observou-se um chamado “Efeito trampolim” no qual ao depender da altura da dispersão e da barreira de contenção, ocorre a potencialização do efeito e a extensão é maior do que em casos de campo aberto.

Pontiggia *et al.*, (2014) utilizaram de simulações computacionais para liberações gasosas na presença de obstáculos sob duas óticas diferentes: Modelos Integrais e Modelos Fluidodinâmicos. O estudo teve como intuito validar a capacidade de modelos de CFD em performar cálculos de jato livre comparados com modelos integrais e mostrar problemas de superestimação dos modelos integrais na análise de liberações com obstáculos.

Derudi, *et al.*, (2014) propuseram, após realizar estudos em CFD, um método para verificar, através de um parâmetro adimensional, se os obstáculos em um caso de liberação de gases pesados eram de grande influência ou não, e assim definir a utilização de um método integral ou uma simulação em CFD e se esses obstáculos deveriam ser considerados ou não na análise de contenção das liberações. Ainda, o estudo propunha que se o parâmetro também poderia ser usado para dimensionar eficientemente barreiras de contenção no meio industrial.

Tolias e Venetsanos, (2015) realizaram testes com diferentes modelos convectivos para utilização em simulações em CFD de vazamentos de hidrogenio a alta pressão com presença de obstáculos. Foram testadas as convergências e concordâncias de diferentes modelos com perfis de liberação e determinados dentre os modelos os de melhor aderência ao estudo proposto.

2.2. Estado Atual da Arte

Bénard *et al.*, (2016) investigaram o efeito de superfícies paralelas e adjacentes a vazamentos de alta pressão de hidrogênio, em vazamentos verticais, horizontais e adjacentes. Verificou-se uma grande influencia do efeito Coanda, quando um fluido permanece unido a uma superfície adjacente, fenômeno que influenciava diretamente na extensão máxima alcançada pelo vazamento, verificou-se também que a maior densidade do metano influenciou diretamente para que a extensão final fosse maior.

Hall *et al.*, (2016) estudaram por meio de experimentos e simulações de fluidodinâmica computacional o comportamento de liberações de alta pressão de hidrogênio próximo a superfícies paralelas. Observou-se que quanto mais próximo da superfície, maior é a extensão máxima da pluma. Nos experimentos também colocou-se uma superfície paralela ao vazamento, mas acima da liberação. Observou-se uma diminuição da máxima extensão da pluma quando comparada com quando a superfície está posicionada abaixo do vazamento, efeitos de diferença de densidade entre meio e gás tiveram grande influência no fenômeno.

Pugh, Bosauder e Parnell, (2017) estudaram e revisaram uma classificação de áreas perigosas realizada na planta química de uma Indústria de produção de hidrogênio e verificaram com a ajuda da fluidodinâmica computacional e dos modelos de dispersão gasosa com ação da gravidade o acúmulo e a dispersão

do hidrogênio em um ambiente fechado, os estudos verificaram uma superestimação da área perigosa analisada.

Souza *et al.*, (2019) estudaram, a partir de ferramentas de CFD, uma forma analítica de calcular a extensão da pluma em classificação de áreas perigosas como função de concentração e fluxo molar de gás, e também verificaram uma superestimação nos parâmetros utilizados até então.

Colombini e Busini (2019) analisaram, através de ferramentas de CFD, a influência de determinados parâmetros como ângulo, distância, altura, diâmetro e deslocamento de um cilindro de armazenamento de gás com relação a um vazamento de alta pressão de metano. O estudo confirmou importantes premissas com proporcionalidade de grandezas como diâmetro de orifício e extensão da pluma, e a relação entre a altura do orifício com relação ao solo e suas dispersões horizontais e verticais. Observaram-se também tendências com relação à influência do solo e de como a extensão varia com a variação da distância do tanque.

Fatahian, Salarian e Fatahian (2020) estudaram as influências de velocidade de vento, direção da nuvem de poluente e seu movimento, em frações mássicas e distribuição de pressão no ambiente a partir de uma dispersão de gás em um ambiente residencial. Foram também analisadas as influências dos modelos de turbulência e a influência do vento na dissipação da nuvem de poluente.

Mehdi e Panin (2020) analisaram com o auxílio de ferramentas CFD a dispersão de materiais produzidos em Plantas de produção a partir de energia nuclear em contato com diferentes obstáculos e compararam com dados obtidos através de dados experimentais fonte de túneis de vento para analisar a concordância dos dados e futuramente estudarem dispersão em larga escala e exposição para os colaboradores e áreas públicas adjacentes.

Colombini, *et al.*, (2020) forneceram, após um estudo com o auxílio de ferramentas de simulação em fluidodinâmica computacional um método simples e rápido que pode ser utilizado para calcular a máxima extensão de uma pluma de alta pressão de metano próxima a uma superfície horizontal (considerada como solo nas simulações). No método, tendo em mãos o diâmetro do orifício, a distância do solo e as informações do gás, pode-se facilmente estimar uma extensão para a dispersão gasosa.

Colombini *et al.*, (2021) estudaram, através de técnicas de CFD, a influência de um *rack* de canos na dispersão de uma pluma de gás metano de alta pressão em um ambiente industrial, comparando-a com o jato livre. Analisaram-se parâmetros como a quantidade de canos, conformação, angulação do rack e distância dos mesmos e, verificaram que, em alguns casos foi possível ver o aumento da extensão máxima de dispersão da pluma a depender dessas configurações. No trabalho, desenvolveu-se um método analítico para calcular a extensão de dispersão através do conjunto de análises feitas.

3. MATERIAIS E MÉTODOS

O presente trabalho faz parte de um projeto, intitulado BREx, envolvendo o Laboratório de Experimentação Numérica de Processos (LENP), situado na Universidade Federal de Campina Grande, e a Petrobrás, sediada no Rio de Janeiro - RJ, que visa a otimização e digitalização de processos de classificação de áreas de risco na empresa por meio da utilização de simulações numéricas por Fluidodinâmica Computacional (CFD) e Simulações em softwares de processo.

3.1. Fluidodinâmica Computacional

A fluidodinâmica computacional é uma ferramenta baseada em simulações computacionais que resolvem equações governantes de massa, energia, e momento para sistemas físicos, químicos e de diferentes natureza. A equação 1 é caracterizada como Equação da Continuidade e, é dada pela seguinte relação, sendo \mathbf{U} e ρ velocidade e densidade, respectivamente:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (1)$$

A equação 2 é definida como Equação de Momento e é definida pela seguinte relação, sendo S_M o termo fonte de momento:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \tau + S_M \quad (2)$$

O tensor $\nabla \tau$ é definido pela seguinte relação:

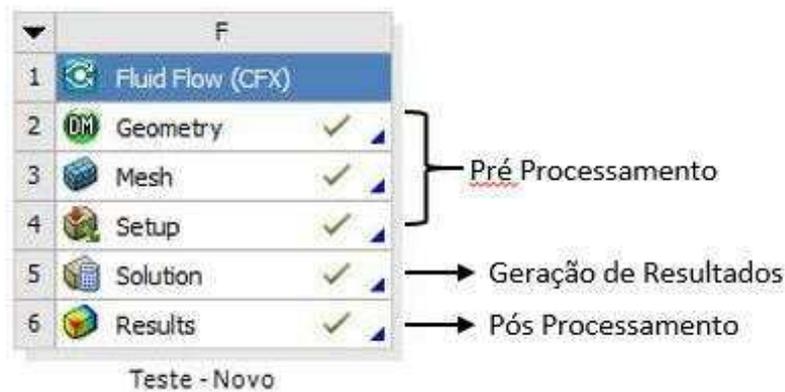
$$\tau = \mu(\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T - \frac{2}{3} \delta \nabla \mathbf{U}) \quad (3)$$

Outra relação de grande importância na resolução de problemas em fluidodinâmica computacional é a equação da Energia, que é definida pela primeira lei da Termodinâmica. Sendo $\nabla(\mathbf{U} \tau)$ o trabalho realizado pelas forças viscosas e $\mathbf{U} S_M$ o trabalho realizado devido a forças de momento externas e geralmente é desconsiderado.

$$\frac{\partial(\rho h_{tot})}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{U} h_{tot}) = \nabla(\lambda \nabla T) + \nabla(\mathbf{U} \tau) + \mathbf{U} S_M + S_E \quad (4)$$

A simulação numérica em CFD aqui presente foi realizada no ANSYS CFX® versão 2020 e pode ser dividida em 3 etapas: Pré processamento, Geração de Resultados e Pós Processamento.

Figura 3.1 - Etapas da definição de uma simulação no ANSYS CFX®



Fonte: Do Autor (2021)

3.2. PRÉ PROCESSAMENTO

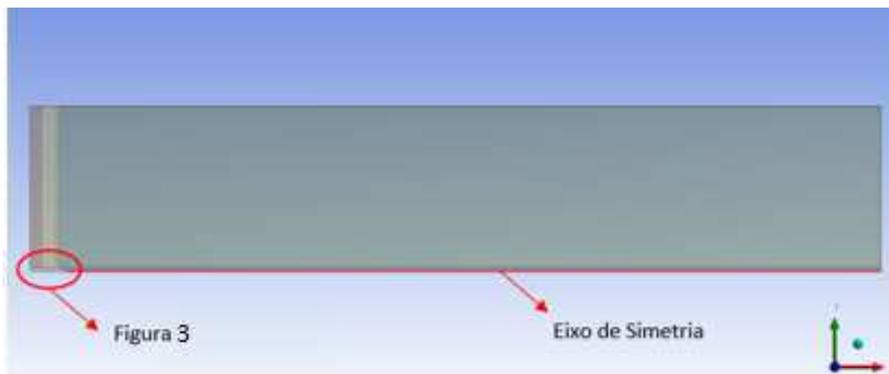
Também subdividido em três etapas, o pré processamento é dividido entre geração da geometria do domínio de estudo, geração da malha numérica e definição das condições de contorno do caso de estudo. Cada uma das etapas ao ser processada alimenta a próxima, que assim segue.

3.2.1. Geração da Geometria

A geometria (Figuras 3.2 e 3.3) é uma adaptação do caso utilizado por Oliveira (2019), sendo uma fatia de 4° de um domínio de estudo, representando um vazamento gasoso em direção a um obstáculo, tendo como suposição a formação simétrica da pluma de gás, como observado em experimentos por Allen (1998) permitindo a redução do domínio sem perdas na precisão de resultados, otimizando tempos e esforço computacional. Tendo como maior diferença o fato de que foi realizada uma subdivisão e diferentes domínios de modo que pudesse ser criado o obstáculo e um melhor refino da malha numérica.

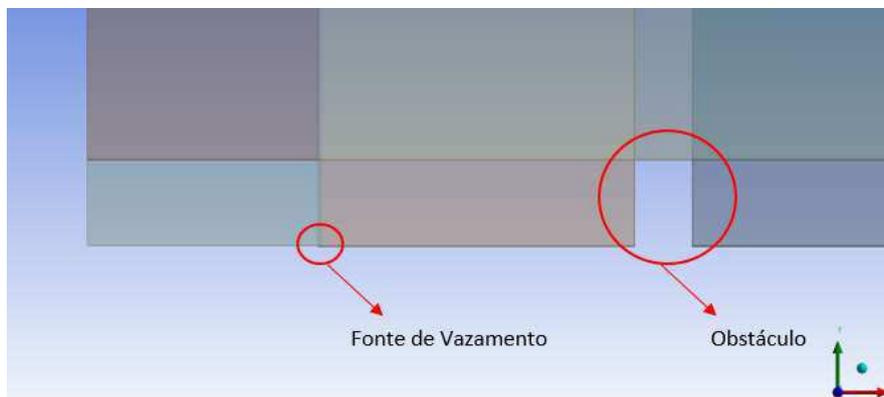
O obstáculo é representado como sendo uma ausência de domínio na área, uma barreira sólida na qual será analisada a sua influência na dispersão do gás. Uma versão de geometria e malha sem a presença do obstáculo também foi gerada para a comparação de casos e a realização de uma simulação considerando jato livre.

Figura 3.2 - Representação do domínio no Design Modeler do ANSYS®



Fonte: Do Autor (2021)

Figura 3.3 - Aproximação da região do vazamento e obstáculo



Fonte: Do Autor (2021)

3.2.2. Geração da Malha Numérica

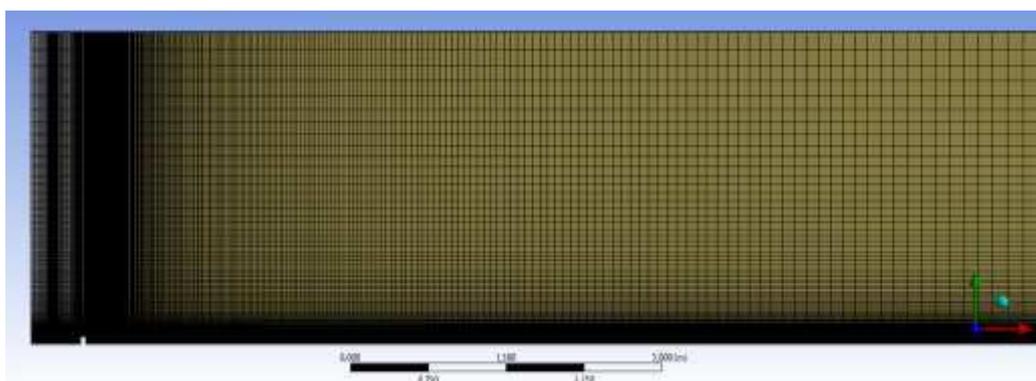
A Malha numérica foi gerada no *ICEM Meshing*, módulo interno do ANSYS®. A malha foi refinada próximo ao vazamento, paredes e obstáculos para o caso de estudo, para que nesses pontos, possa-se ampliar a precisão dos resultados, visto que quanto maior a quantidade de elementos de cálculo na área de estudo, maior quantidade de dados gerada naquela região. (Figuras 3.5 e 3.6). O quadro a seguir mostra mais informações gerais sobre a malha numérica.

Tabela 3.1 - Informações sobre a malha numérica do caso de estudo

Dados médios dos Elementos de Malha da Simulação Numérica	
Número de Nós	Número de Elementos
192 466	95 880

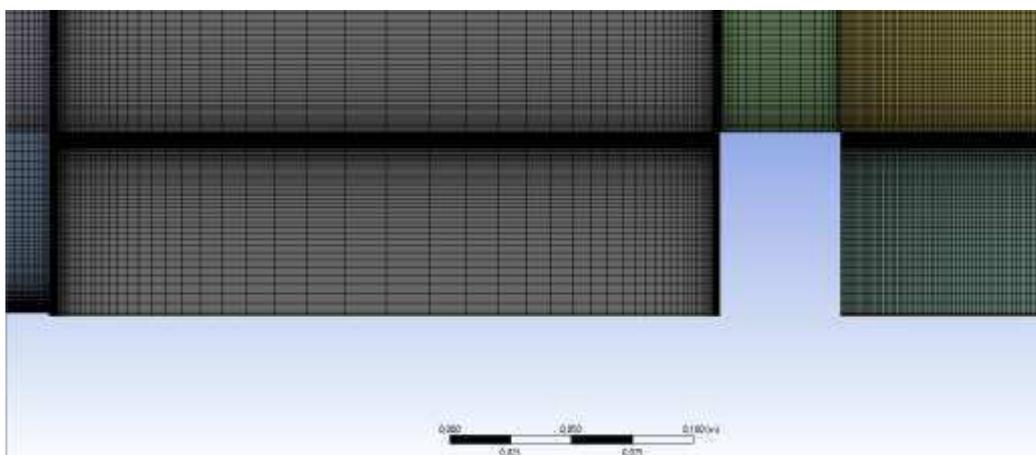
Fonte: Do Autor (2021)

Figura 3.4 - Malha numérica do domínio gerada pelo ICM



Fonte: Do Autor (2021)

Figura 3.5 - Aproximação do Obstáculo e Orifício para a Malha numérica



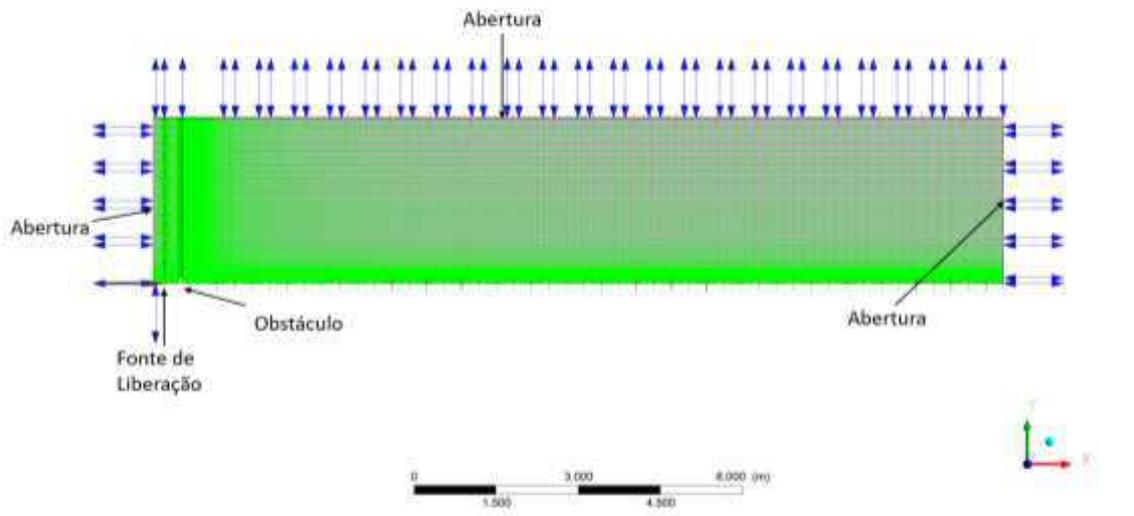
Fonte: Do Autor (2021)

3.2.3. Definição das Condições de Contorno

As condições de contorno do caso de estudo foram geradas a partir das condições de armazenamento dos gases. Foram considerados que todos os gases estão armazenados às temperaturas e pressões de 300K e 18 bar. No domínio de estudo foram consideradas aberturas para o ambiente em seus

limites ortogonais e paralelos ao eixo de simetria e como condições de contorno foram definidas as condições ambiente de temperatura e pressão, o orifício tem diâmetro de 2,5 mm. A Figura 6 mostra como foram definidas as condições de contorno do caso de estudo.

Figura 3.6 - Definição das condições de contorno do domínio de estudo



Fonte: Do Autor (2021)

3.2.4. Definição da Simulação e de Grandezas

Cada simulação realizada, cada vazamento, produz uma pluma de gás, que como resultado extraído tem-se volume e extensão, que é a maior distância que o gás alcança em uma determinada concentração e que pode ser diretamente no eixo de vazamento ou em diferentes direções, a depender de condições de obstáculos.

3.2.4.1. DEFINIÇÃO DE GRANDEZAS NORMALIZADAS

De modo que se possa avaliar diferentes gases, mesmo que às mesmas condições, todas as grandezas aqui analisadas tiveram de ser normalizadas com relação às dispersões dos gases sem a presença de obstáculo, ou jato livre. Dessa forma pode-se ter a dimensão do quanto cada gás está variando volume e extensão com relação ao seu par em uma condição padrão. A seguir, estão as grandezas normalizadas que aqui foram utilizadas.

O volume da pluma normalizada (Equação 5) é a relação entre o volume da pluma com a presença de obstáculos (V_i) e o seu par sem a presença de obstáculos (V_0):

$$VPN = \frac{V_i}{V_0} \quad (5)$$

Da mesma forma, a extensão da pluma normalizada (Equação 6) é a relação da extensão da pluma com a presença de obstáculo (E_i) e a sua correspondente sem a presença de obstáculos (E_0).

$$EPN = \frac{E_i}{E_0} \quad (6)$$

A distância característica (Equação 7) é uma grandeza intermediária criada para o propósito desse estudo (utilizada para cálculos de outras grandezas importantes) que é uma relação entre o volume e a extensão da pluma. A representação geométrica mais simples seria do raio de um cone formado pela dispersão gasosa.

$$DC = \sqrt{\frac{3 Vol}{\pi Ext}} \quad (7)$$

A Posição do obstáculo normalizado (Equação 8) é a relação entre a distância do obstáculo ao vazamento (X_{obst}) e a extensão da pluma sem a presença obstáculo (E_0). Dessa maneira, quando analisam-se diferentes gases, pode-se saber se todos têm o obstáculo posicionado relativamente no mesmo lugar quanto à sua extensão.

$$PON = \frac{X_{obst}}{E_0} \quad (8)$$

O Raio do obstáculo normalizado (Equação 8) é a relação entre o raio do obstáculo (r_{obst}) e a distância característica da pluma sem obstáculo (DC_0), dessa forma pode-se saber se a altura relativa dos obstáculos é a mesma para diferentes dispersões.

$$RON = \frac{r_{obst}}{DC_0} \quad (9)$$

Sendo as variáveis com índice 0 as variáveis referentes às simulações base de jato livre (Sem a presença do obstáculo), as variáveis com índice i as referentes às simulações com obstáculos. X_{obst} e r_{obst} são a posição e o raio do obstáculo em metros, respectivamente.

Para colocarem-se todos os gases às mesmas condições normalizadas, faz-se o cálculo inverso do que está apresentado nas equações. Por exemplo, para garantir que todos os gases estão à mesma condição de raio normalizado de valor arbitrário, munidos da distância característica de uma pluma sem obstáculos, calcula-se o raio de obstáculo equivalente àquele caso, o que será diferente para cada gás, mas será o mesmo em termos normalizados.

3.2.4.2. DESIGN DE EXPERIMENTOS

Para a primeira parte do estudo, foi realizado um design de experimentos, no qual, a fim de analisarem-se os diferentes gases às mesmas condições normalizadas, variaram-se as posições e raios normalizados dos obstáculos relativos a cada gás e analisadas as variações de volume e extensão produzidas a partir das condições dadas.

No presente estudo foram analisados os comportamentos de três gases, Metano, Etano e Gás Carbônico, cada gás teve seus resultados analisados a três concentrações diferentes (3%, 1,5% e 0,75%). A diferença de massa entre os três gases fornece um bom intervalo para que as relações propostas sejam válidas.

Os quadros a seguir apresentam as condições de estudo para cada gás. São 16 simulações para cada gás em cada concentração, totalizando 144 simulações.

Tabela 3.2 - Definição do Design de Experimentos no Estudo

Posição do Obstáculo Normalizada (PON)	Raio do Obstáculo Normalizado (RON)
0,2	0,2
0,2	0,4
0,2	0,6
0,2	0,8

0,4	0,2
0,4	0,4
0,4	0,6
0,4	0,8
0,6	0,2
0,6	0,4
0,6	0,6
0,6	0,8
0,8	0,2
0,8	0,4
0,8	0,6
0,8	0,8

Fonte: Do Autor (2021)

Tabela 3.3 - Informações sobre os gases Utilizados

Gás	Massa (g/mol)	Concentrações (% Mol/Mol)
Metano	16.04	3%
		1,5%
		0,75%
Etano	30.07	3%
		1,5%
		0,75%
Gás Carbônico	44.01	3%
		1,5%
		0,75%

Fonte: Do Autor (2021)

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para cada gás foram retirados os valores de volume e extensão às mesmas concentrações (frações molares): 3%, resultados à metade e $\frac{1}{4}$ dessa concentração também foram coletados. Foram plotados volume e extensão normalizados versus Raio e Posição normalizadas, a seguir estão os resultados coletados, as regressões e análises de dados.

4.1. Design de Experimentos (DOE)

A seguir são apresentadas as avaliações do Design de experimentos, as análises dos próximos tópicos são apresentadas por meio de gráficos de efeitos isolados e de contorno.

4.1.1. Análise de DOE e Visualização de Resultados

A análise do design de experimentos foi realizada com a utilização do *software* estatístico comercial Minitab® versão 2019 e Matlab® R2018a. Foram coletados os valores de extensão e volume das plumas em cada uma das situações, realizada a normalização de cada uma por meio das equações (5) e (6). O *software* Minitab realiza regressões de diferentes parâmetros, levando em conta médias e grandezas estatísticas para trazer as melhores relações matemáticas e gráficos de efeitos que as variáveis podem produzir na resposta.

O Matlab® foi utilizado para gerar as regressões matemáticas para os modelos, uma vez obtidos os gráficos de contorno e interação do *software* supracitado.

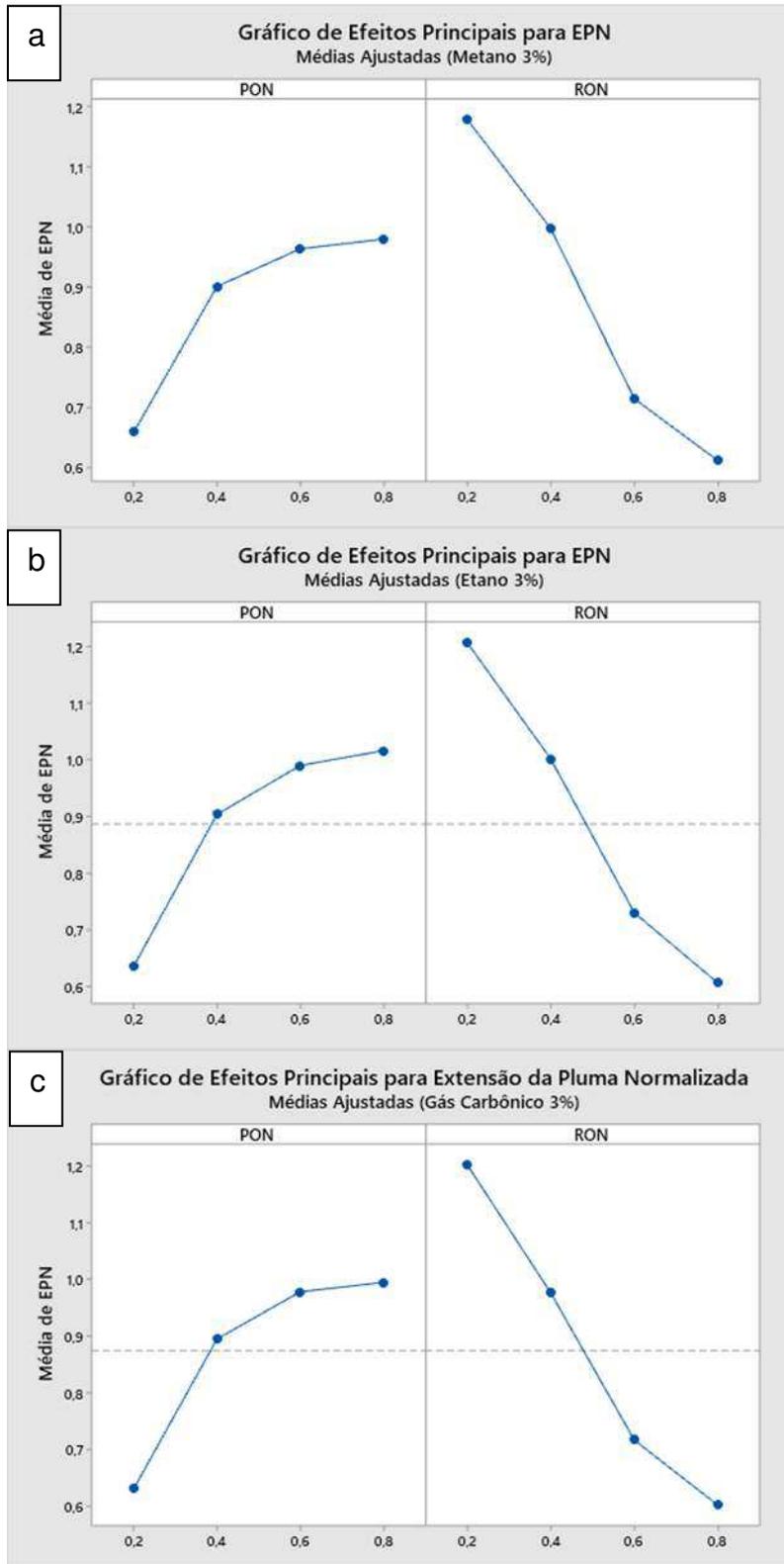
4.1.1.1. Análise dos Gases à concentração de 3%

Os dados de metano, após os tratamentos de dados são apresentados a seguir nas formas de gráficos de interação e contorno.

A. Extensão

A figuras 4.1 (a, b e c) apresenta como a posição e raio normalizado do obstáculos produzem uma resposta na extensão da pluma normalizada. Aqui, os efeitos mostram isoladamente como a extensão é afetada, para os diferentes gases às mesmas condições normalizadas e mesma concentração. de efeitos

Figura 4.1 - Gráfico de efeitos isolados para a extensão a 3%
a. Metano; b. Etano; c. CO₂ (mol/mol)



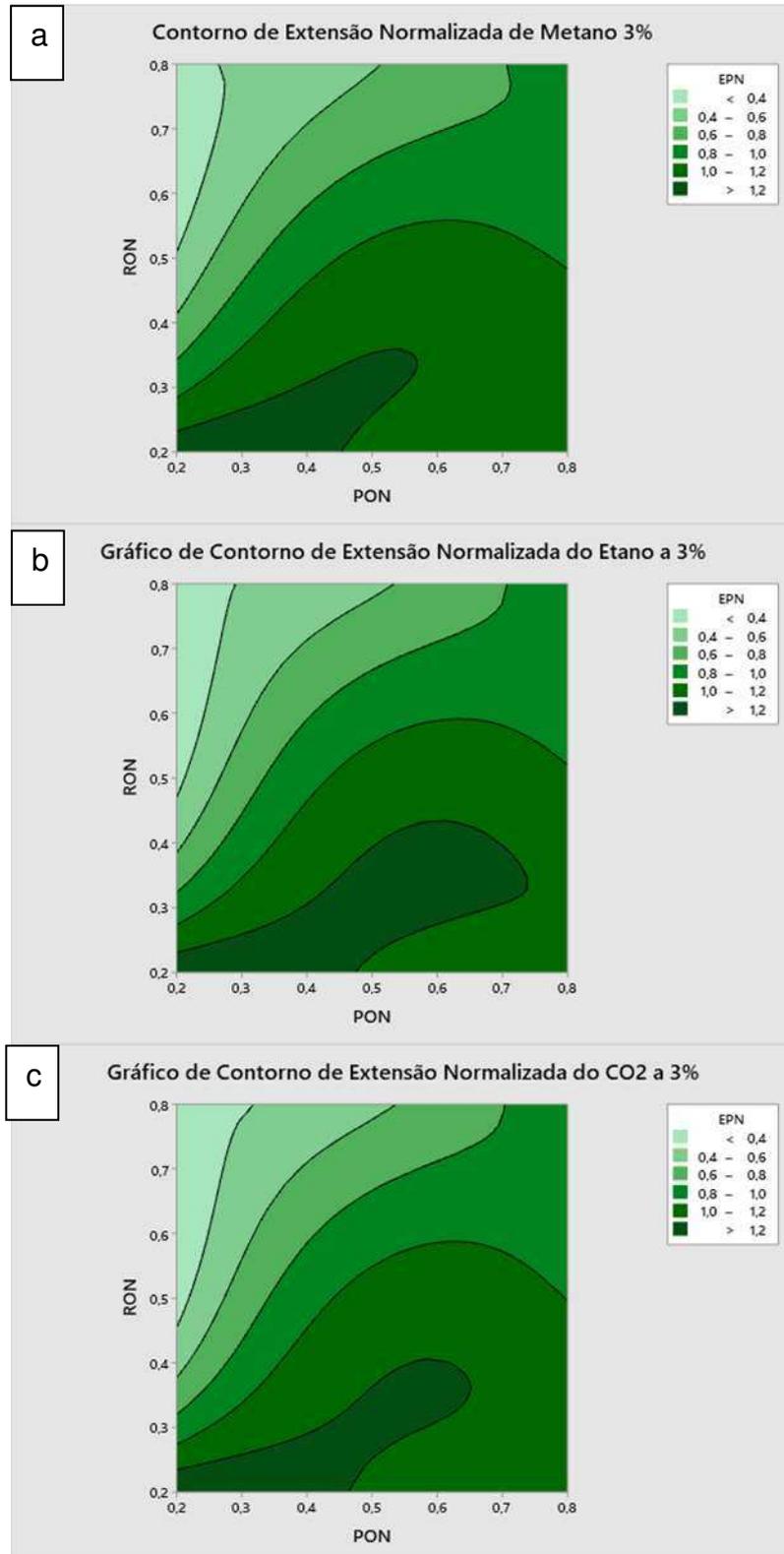
Fonte: Do Autor (2022)

Pode-se observar isoladamente que: No quadro da esquerda, quanto mais próximo estiver o obstáculo da dispersão, menor será a extensão da pluma, nesse sentido, o obstáculo atua influenciando negativamente a dispersão da pluma de gás, atuando como uma barreira e mitigando seu espalhamento, à medida que gradualmente afasta-se da origem, o valor da extensão tende a aumentar e estabilizar em 1, lugar onde o obstáculo está distante o suficiente para não influenciar a dispersão e atuar como jato livre.

Em contrapartida, no quadro à direita, no efeito isolado do raio do obstáculo pode ser avaliado que quanto menor o obstáculo maior a extensão que a pluma alcança, aqui, a depender do raio normalizado do obstáculo, pode-se observar algo como um “efeito de trampolim”, no qual após bater no obstáculo o jato alcança uma distância maior que a do jato livre. As figuras mostram como, nitidamente os diferentes gases, quando submetidos às mesmas condições têm respostas semelhantes às mudanças que a presença do obstáculo causa nas plumas de gás.

Na figura 4.2 pode-se identificar que as regiões de baixos valores de posição e baixo raio obstáculo que produzem valores mais altos de extensão, ou seja, obstáculos pequenos e a baixas distâncias do vazamento tendem a produzir extensões maiores de plumas.

Figura 4.2 - Gráfico de Contorno de Extensão x PON x RON
a. Metano; b. Etano; c. CO2



Fonte: Do Autor (2022)

B. Volume

A figura 4.3 mostra como o volume comporta-se com a variação do raio e posição normalizados, atuam no volume pluma de gás. Aqui, pode-se observar um efeito inverso ao caso anterior, vê-se no quadro da esquerda que quanto mais próximo o obstáculo do vazamento maior a variação de volume que há na pluma, aqui, de mais de 2,2 vezes o volume da pluma de um jato livre para o Metano, quando analisam-se Etano (b) e Gás Carbônico (c), vê-se que os dois possuem perfil mais parecido entre si, no qual um valor intermediário de posição de obstáculo têm maior influência que outros na dispersão, tal efeito pode ser explicado pela região em si, na qual o perfil de velocidade pode não ter desenvolvido-se totalmente em uma distância menor e sim na intermediária.

No quadro da direita, vê-se que há um raio intermediário que atua mais fortemente no aumento do volume da pluma que os outros. Observa-se também que há a tendência que o volume aumente sempre que colida com um obstáculo.

A figuras 4.4 apresenta as curvas de contorno para volume dos diferentes gases às concentrações analisadas, com relação a PON e RON. Pode-se identificar que há regiões de baixos valores de posição e obstáculo que produzem valores mais altos de volume, há uma região em específico entre 0,3 e 0,4 RON que há um valor máximo.

4.1.1.2. Análise dos Gases à concentração de 1,5%

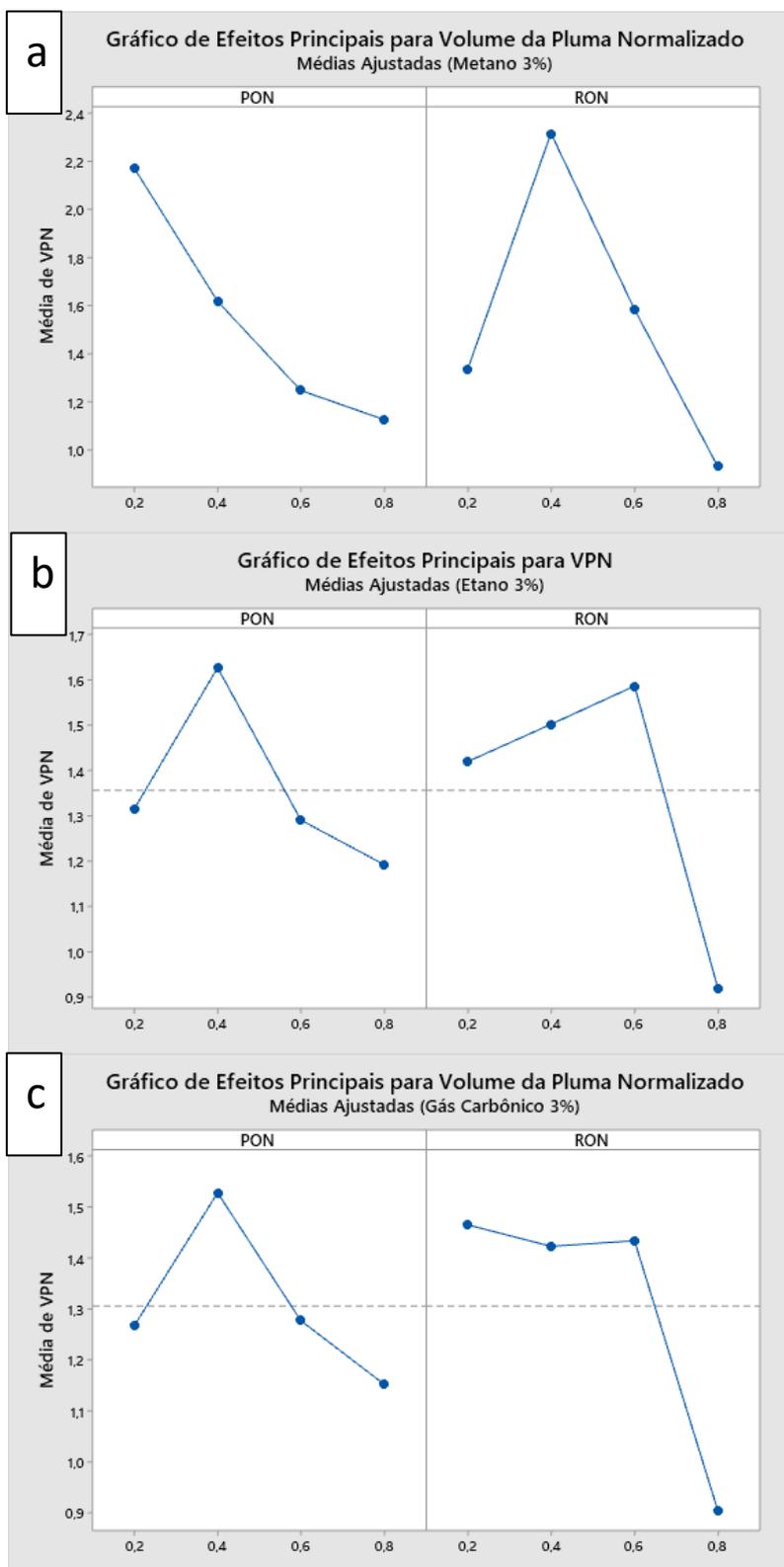
Os dados dos diferentes gases à concentração de 1,5%, após a avaliação do design de experimentos são apresentados nas figuras 4.5 a 4.8 nas formas de gráficos de interação e contorno.

A. Extensão

A figura 4.7 apresenta como a posição e raio normalizado do obstáculos produzem uma resposta na extensão da pluma normalizada. Aqui, os efeitos mostram isoladamente como a extensão é afetada.

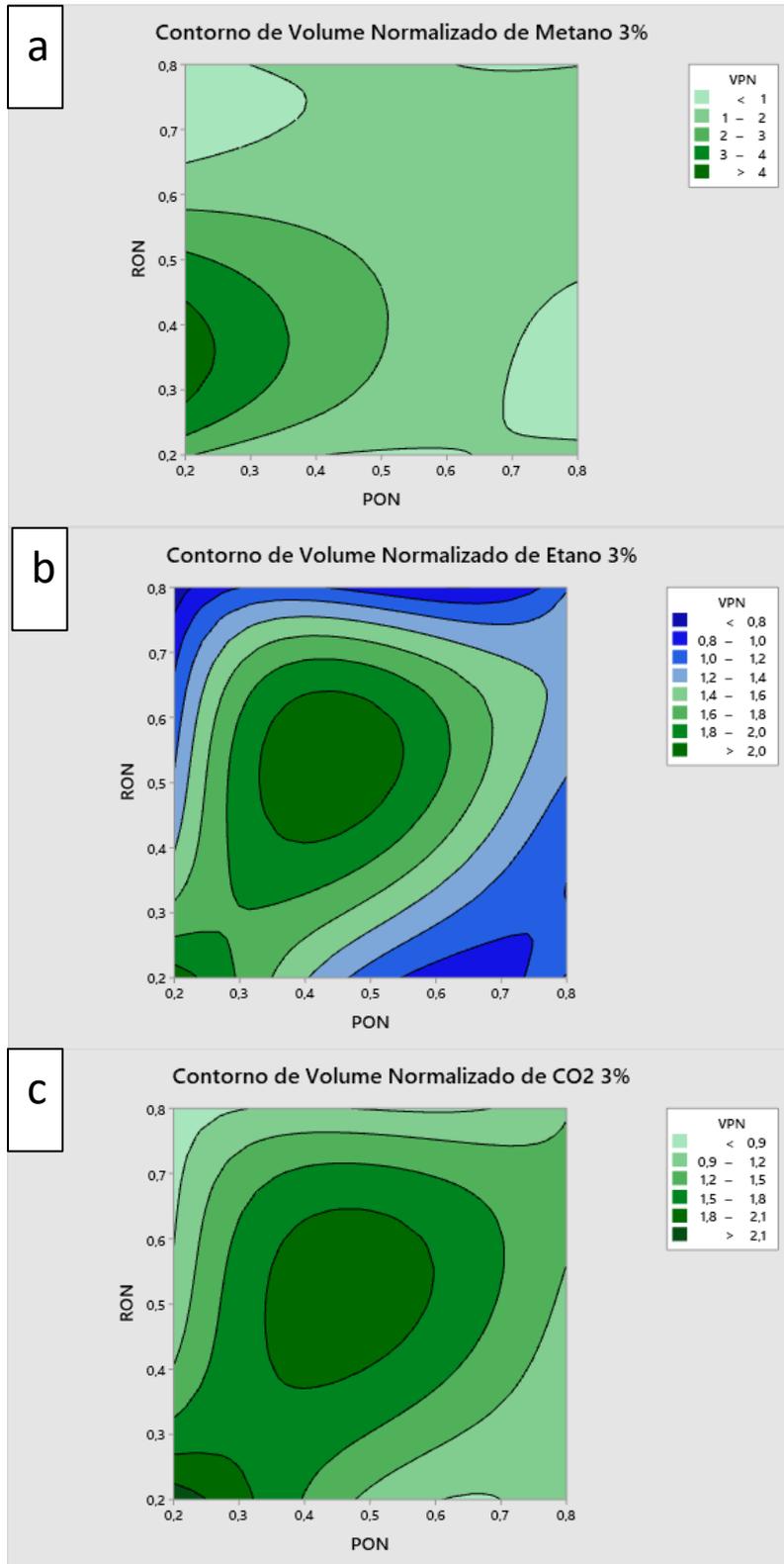
Aqui, pode-se observar também a semelhança nos perfis de dispersão mostrados na figura 4.5, que apresentam como os efeitos isolados atuam na extensão da pluma de gás. Observa-se também, que, analisando o quadro mais à esquerda, quanto mais próximo o obstáculo da dispersão, menor a extensão da pluma, e à medida que afasta-se o obstáculo do vazamento, tal extensão tende a aumentar para o valor unitário, local onde a pluma comporta-se como jato livre pois o obstáculo já está distante o suficiente para não interagir com a dispersão.

Figura 4.3 - Gráfico de efeitos isolados para o Volume a 3%
a. Metano; b. Etano; c. CO₂;



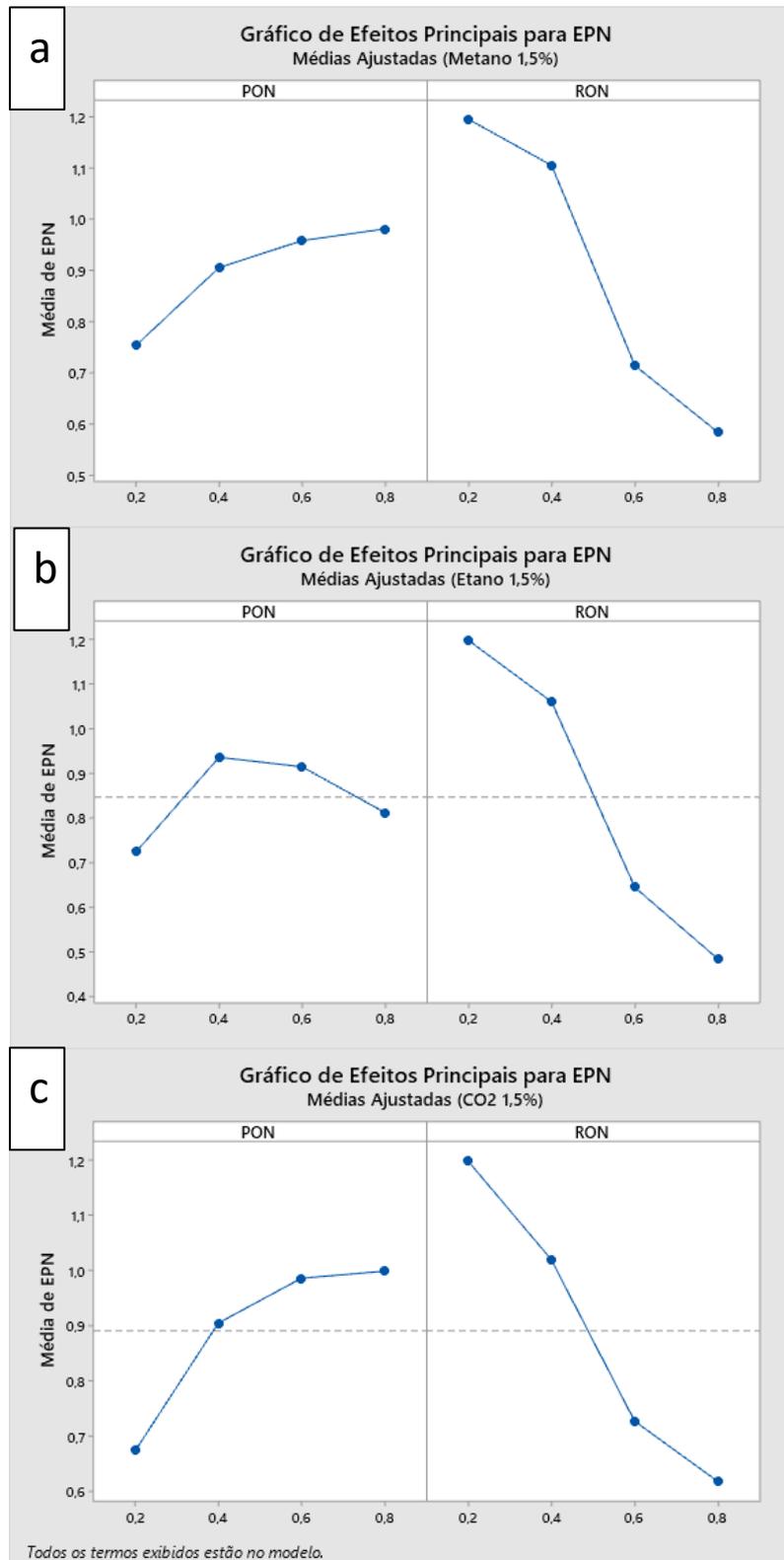
Fonte: do Autor (2021)

Figura 4.4 - Gráfico de Contorno de Volume x PON x RON
a. Metano; b. Etano; c. CO₂;



Fonte: do Autor (2021)

Figura 4.5 - Gráfico de efeitos isolados para a Extensão a 1,5%
a. Metano; b. Etano; c. CO₂;



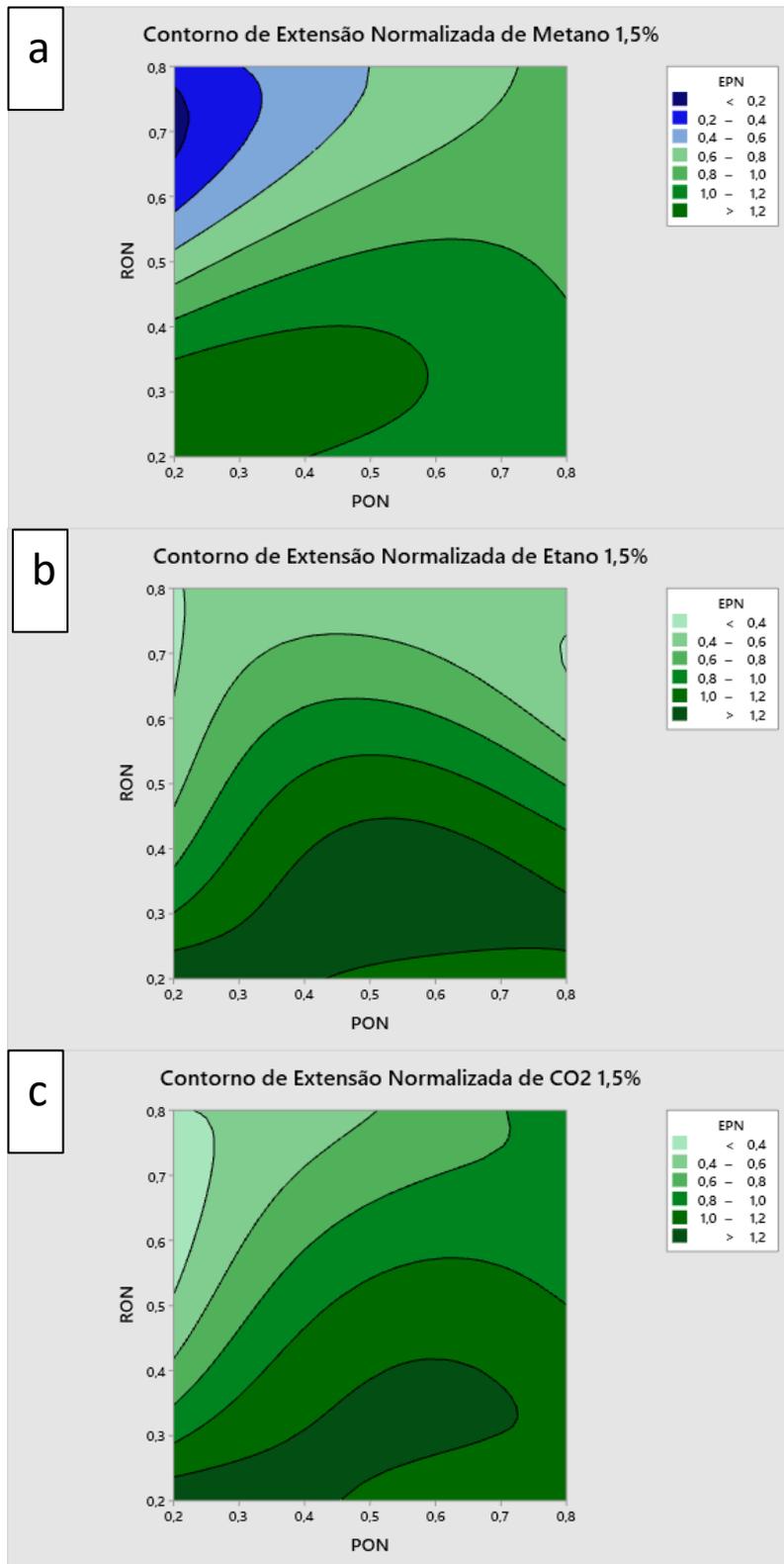
Fonte: Do Autor (2021)

No quadro da direita, vê-se que o perfil é igual para os três gases diferentes, um raio pequeno causa um “efeito trampolim” e aumenta a extensão com que a pluma consegue alcançar, à medida que aumenta-se o raio que se está utilizando, diminui consideravelmente a extensão, pois nesses casos o obstáculo comporta-se como uma parede, travando a dispersão de gás.

A figura 4.6 apresenta as superfícies de contorno dos dados para os diferentes gases. Analisando os perfis apresentados, pode-se observar que as curvas de contorno dos três gases possuem regiões de maior extensão semelhantes e valor máximo de 1,2 em média, ou seja, após atingir o obstáculo, a pluma apresentou uma extensão cerca de 20% maior. Baixos valores de raios de obstáculo e valores baixos a intermediários de posição, uma combinação dos fatores mais preponderantes nas duas grandezas até aqui analisadas.

Em contrapartida, baixas distâncias entre o obstáculo e o vazamento combinados a altos valores de raio de obstáculo produzem baixas extensões, a depender do gás entre 20 e 40% da extensão máxima da extensão de um jato livre.

Figura 4.6 - Gráfico de Contorno de Extensão x PON x RON
a. Metano; b. Etano; c. CO2



Fonte: Do Autor (2021)

B. Volume

A figura 4.7 apresenta os gráficos de como o volume dos diferentes gases varia com a variação de posição e raio de obstáculos.

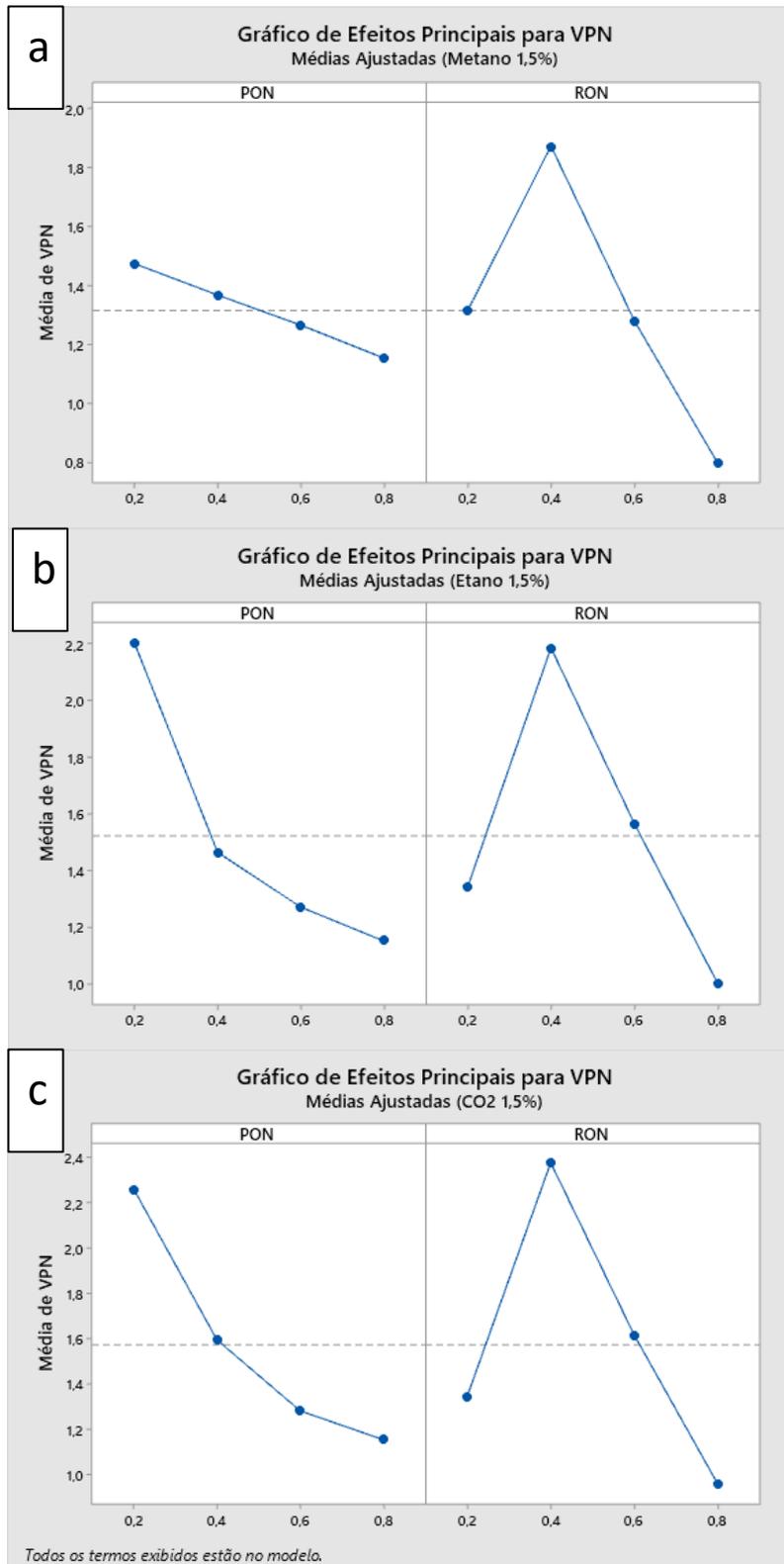
Para os casos aqui apresentados fica clara a semelhança do fenômeno entre os diferentes gases, observa-se que as tendências são as mesmas para os três gases. Para a variação da posição (quadro à esquerda), vê-se que quanto mais próximo o obstáculo da dispersão, maior é a variação produzida no volume, à medida que afasta-se o obstáculo do vazamento, a variação é reduzida e tende à unidade.

Quanto ao raio do obstáculo, observa-se que há um valor intermediário que produz as maiores variações para os três gases, aqui, um valor de $RON = 0,4$. O fenômeno pode ser explicado devido ao fato que pequenos obstáculos são mais fáceis de serem contornados e mantém o formato de “charuto” da pluma. Um obstáculo relativamente maior com que a dispersão tome outros formatos, mais arredondados para que supere a barreira imposta, aumentando seu volume. À medida que aumenta-se mais o obstáculo, a dispersão não mais consegue superar a barreira e o volume é relativamente menor quando comparado a outros raios de obstáculo.

A figura 4.8 mostra as superfícies de contorno para os casos aqui analisados. Aqui, vê-se também a semelhança das curvas de contorno entre os diferentes gases, há uma região em que os valores de volume são altos, e a região é a mesma para os diferentes gases, compreendendo entre 0,3 e 0,4 RON e pouco mais de 0,2 PON. Tal combinação faz com que o volume da pluma seja em média 3 ou 4 vezes o volume da pluma de um jato livre.

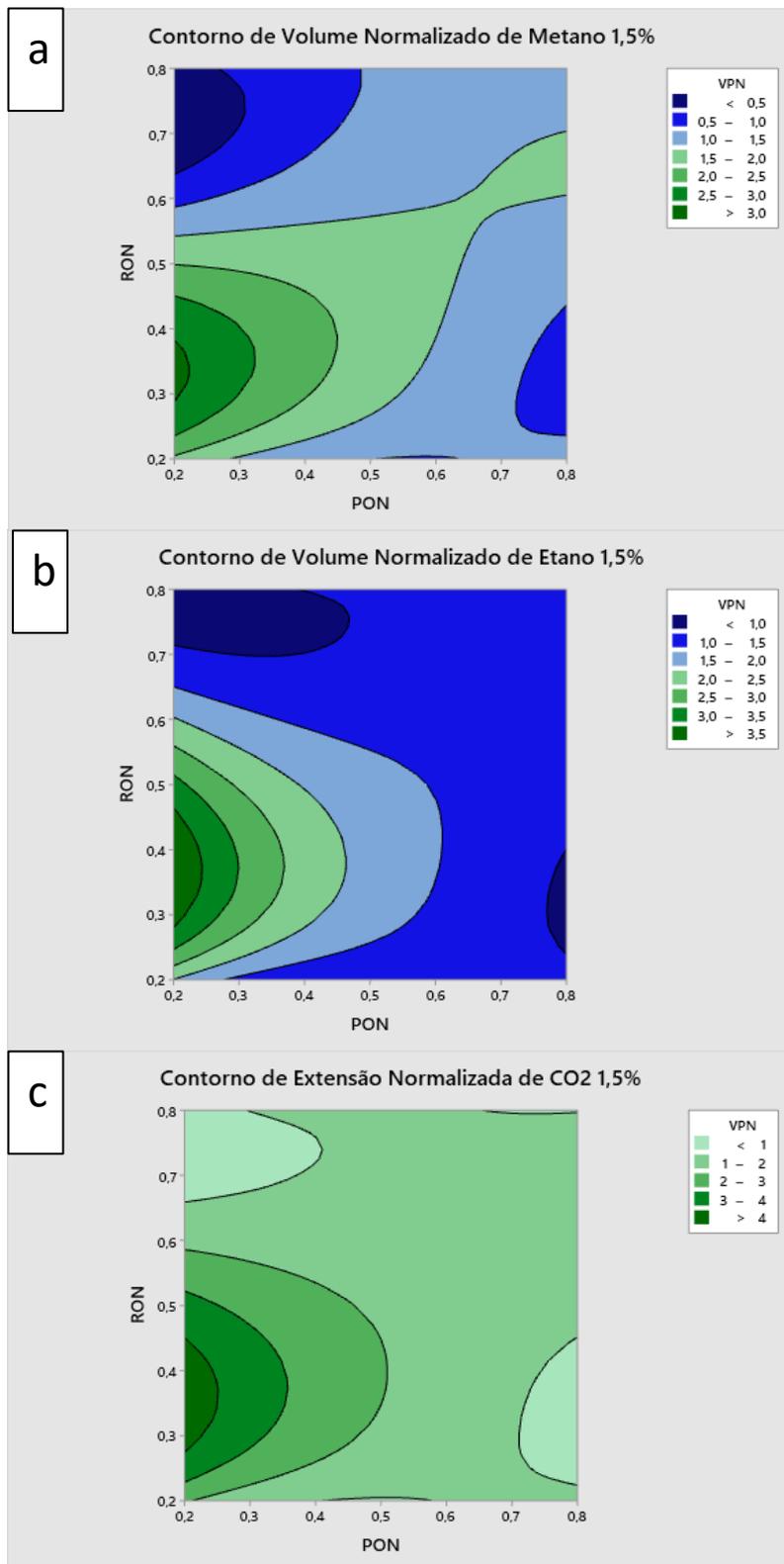
Resultados em que os perfis de dispersão são tão semelhantes entre si são promissores pois tendem a possuir relações matemáticas também semelhantes, assim facilitando a generalização do estudo em uma mesma relação matemática para cada grandeza.

Figura 4.7 - Gráfico de efeitos isolados para o Volume a 1,5%
a. Metano; b. Etano; c. CO₂;



Fonte: do Autor (2021)

Figura 4.8 - Gráfico de Contorno de Volume x PON x RON
a. Metano; b. Etano; c. CO2



Fonte: do Autor (2021)

4.1.1.3. Análise dos gases à concentração de 0,75%

Os dados dos diferentes gases à concentração mais reduzida (0,75%), após os tratamentos de dados são apresentados a seguir nas formas de gráficos de interação e contorno.

A. Extensão

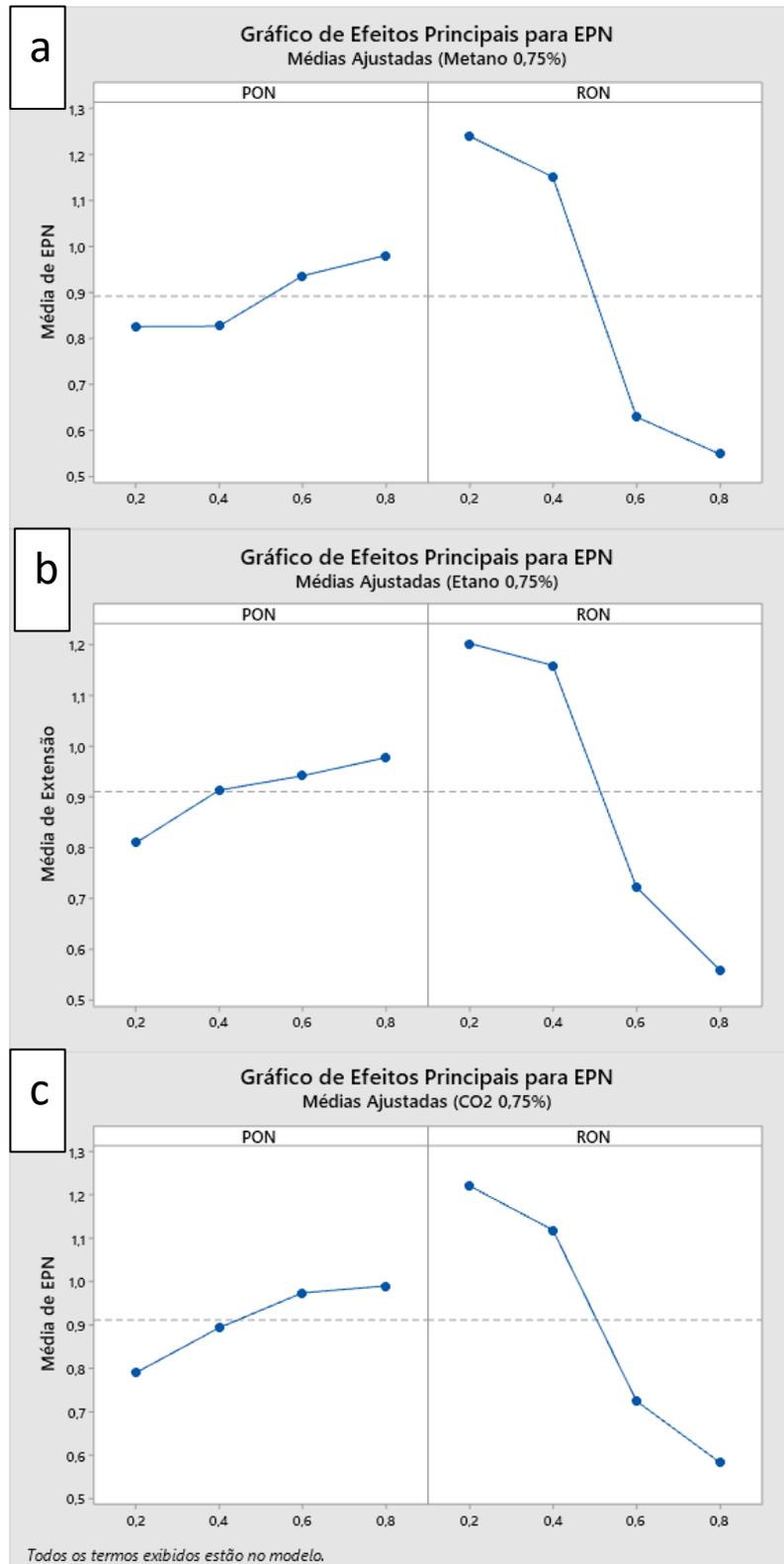
A figura 4.9 apresenta como a posição e raio normalizado do obstáculos produzem uma resposta na extensão da pluma normalizada. Aqui, os efeitos mostram isoladamente como a extensão é afetada.

Os gráficos apresentados possuem os mesmos perfis e tendências dos mostrados anteriormente em outros tópicos e seguem a mesma análise, sugerindo uma boa correlação entre os diferentes gases às mesmas condições tanto para a variação da posição quando to raio do obstáculo.

A figuras 4.10 apresenta as curvas de contorno para a extensão da pluma com relação às concentrações aqui analisadas.

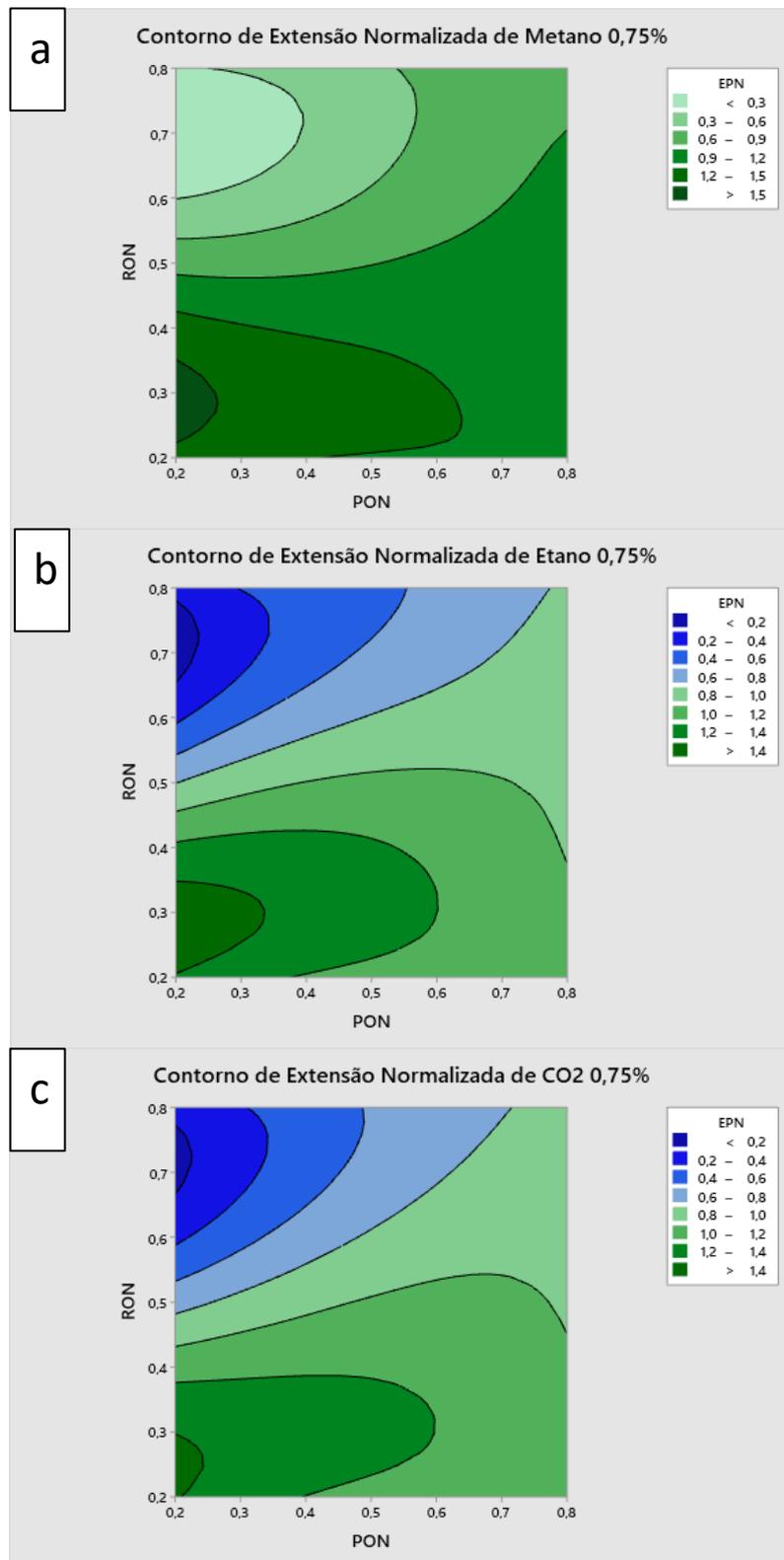
Aqui, as mesmas regiões de maior extensão são encontradas, regiões de baixo Raio (Entre 0,2 e 0,4) e a pequenas distâncias entre vazamento e obstáculo (entre 0,2 e 0,3) que produzem um aumento de extensão de até 50% quando compara-se com a extensão de uma pluma em jato livre.

Figura 4.9 - Gráfico de efeitos isolados para a 1,5%
a. Metano; b. Etano; c. CO₂;



Fonte: do Autor (2021)

Figura 4.10 - Gráfico de Contorno de Extensão x PON x RON
a. Metano; b. Etano; c. CO2



Fonte: do Autor (2021)

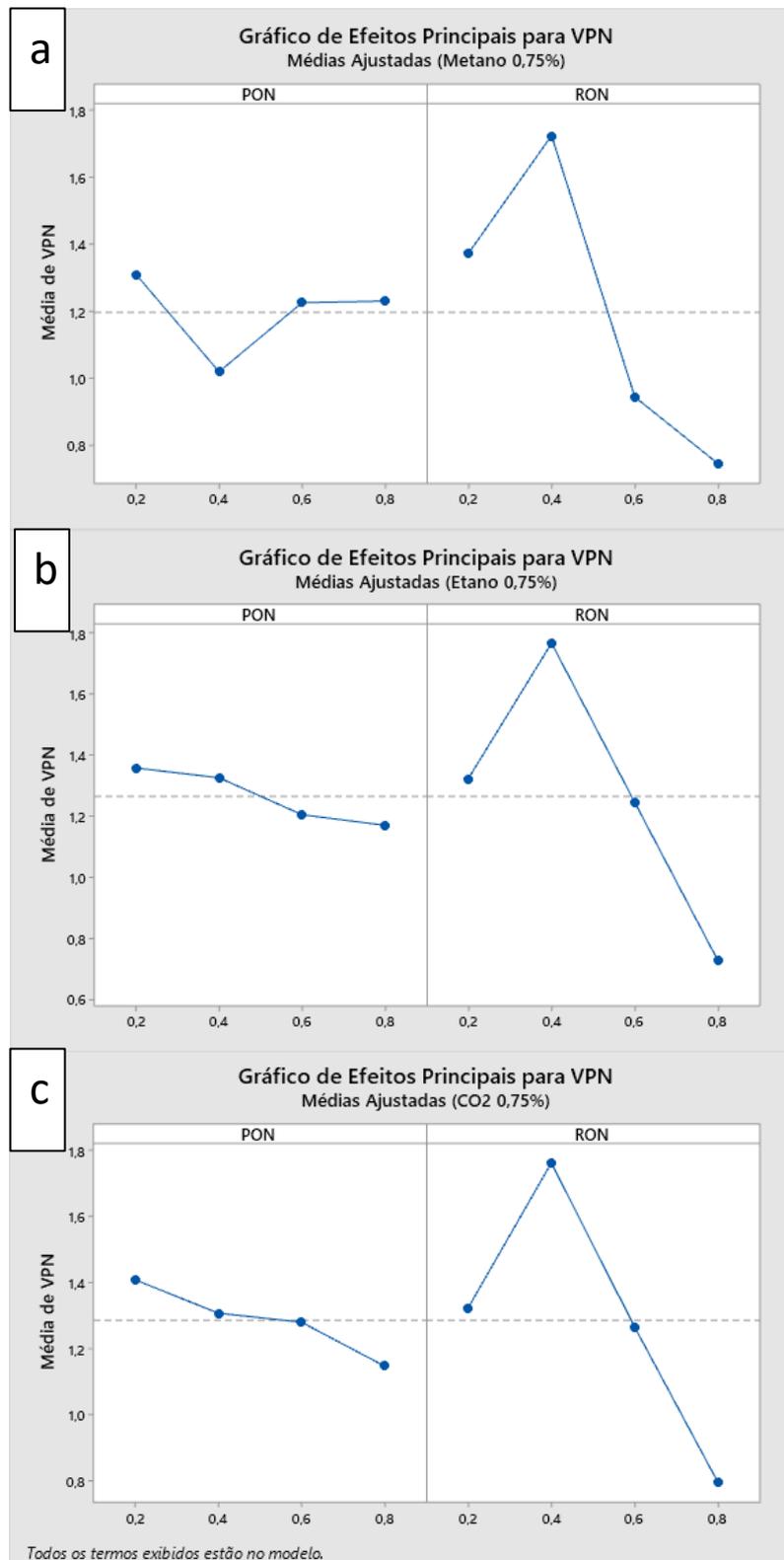
B. Volume

A figura 4.11 apresenta como variou o volume da pluma dos diferentes gases com a variação de raio e distância dos obstáculos.

Observa-se a manutenção das tendências observadas nos pontos anteriormente analisados para obstáculos próximos ao vazamento, têm-se os maiores aumentos de volume, enquanto raios de valor intermediário têm esse efeito, grandes raio de obstáculo atuam como parede e impede realmente a dispersão da pluma

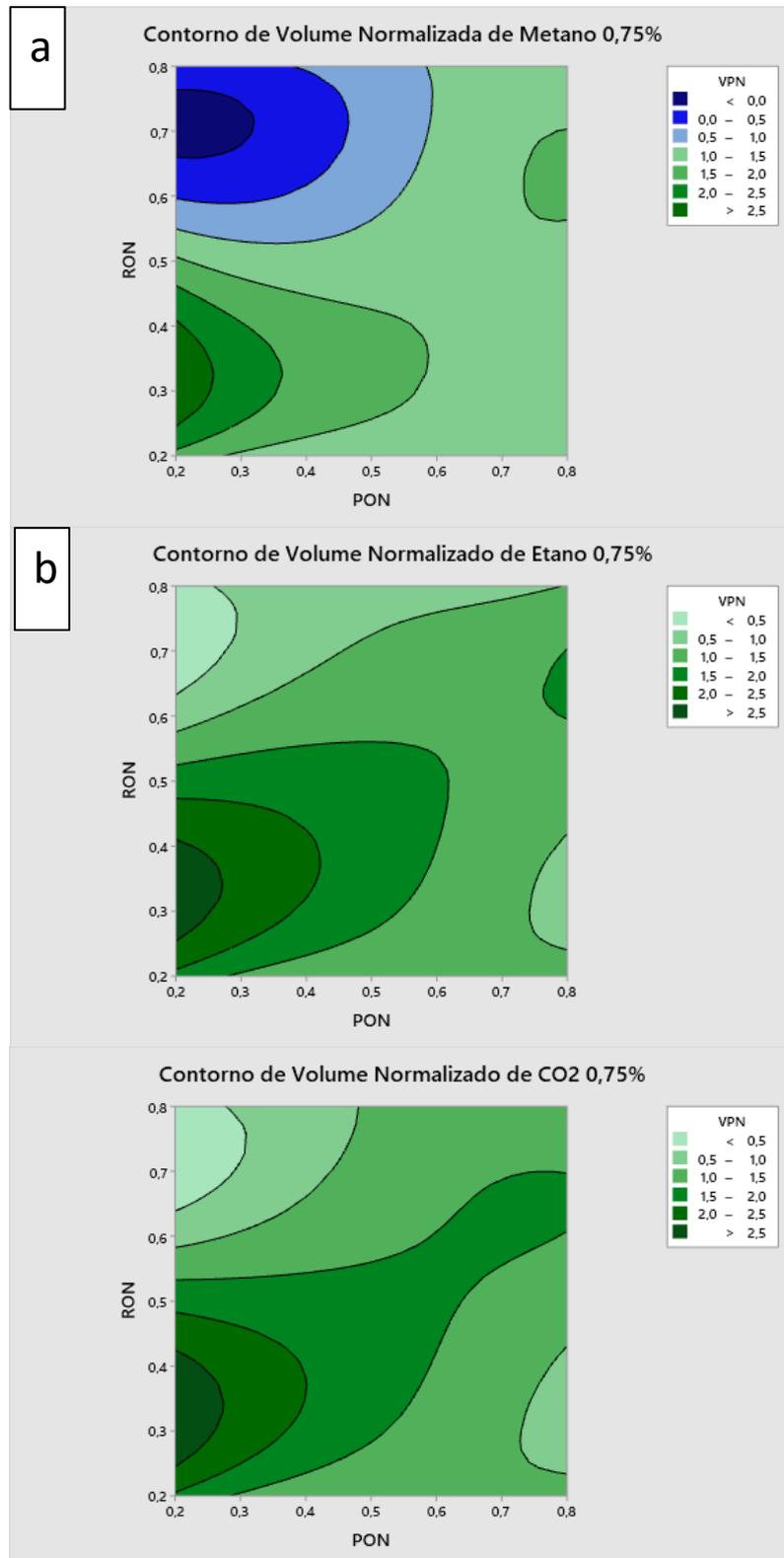
A figura 4.12 mostra as curvas de contorno para os casos aqui apresentados. Nestes casos, assim como nas análises de volume em concentrações anteriores, no qual o volume aumenta de maneira mais acentuada para situações em que se tem o raio normalizado em valores entre 0,2 e 0,4 e posições normalizadas entre 0,2 e 0,4, produzindo volumes de cerca de 2,5 vezes maior que em uma condição de jato livre.

Figura 4.11 - Gráfico de efeitos isolados para o Volume a 1,5%
a. Metano; b. Etano; c. CO₂;



Fonte: do Autor (2021)

Figura 4.12 - Gráfico de Contorno de Volume x PON x RON
a. Metano; b. Etano; c. CO2

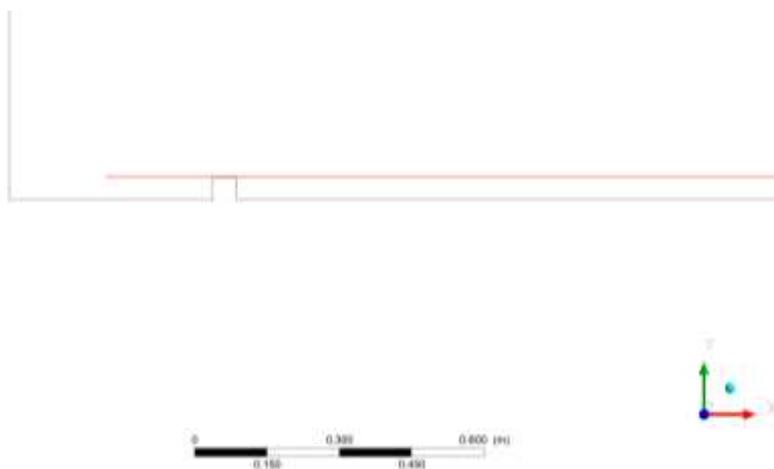


Fonte: Do Autor (2022)

4.1.2. Análise de Velocidade, Dispersão e o Efeito Trampolim

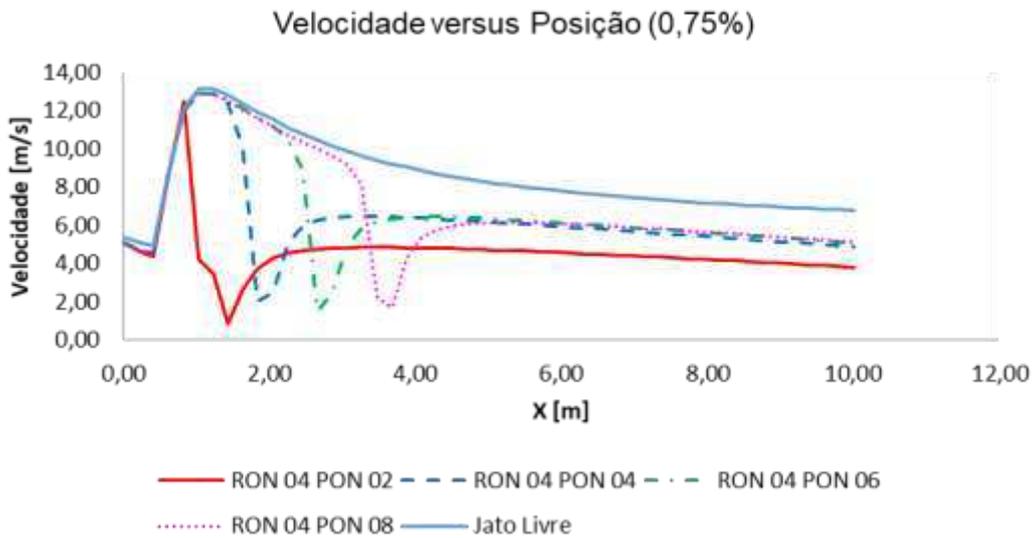
O gráfico a seguir apresenta, a partir de dados retirados das simulações numéricas no CFD, como a velocidade varia com a posição ao longo do eixo de liberação, os dados foram retirados a partir de uma linha à altura de um obstáculo (cerca de 10 cm de raio), pelo fato de o obstáculo ser considerado uma ausência de domínio, não foram retirados dados na linha do eixo de liberação pois nessa região não haveriam resultados disponíveis. Cada uma das curvas apresenta uma condição de posição para um raio fixo. Os valores das velocidades foram retirados logo acima da linha do obstáculo, paralelo ao eixo de simetria como apresentado na figura 4.13.

Figura 4.13 - Representação da Linha acima do obstáculo



Fonte: Do Autor (2022)

Figura 4.14 - Gráfico de Velocidade versus Posição para uma simulação em CFD



Fonte: do Autor (2022)

Pode-se observar que, da curva sólida em vermelho, em um primeiro caso, a velocidade atingida pelo gás é de cerca de 12 m/s, e, pode-se observar que a mesma não alcançou seu valor máximo devido à proximidade do obstáculo. Acredita-se que o aumento da extensão do gás mais proeminente se deve tanto à velocidade quanto à densidade do gás naquela posição, pode se observar como densidade e velocidade variam com a posição, no começo, há mais momento, então a baixa pressão após do obstáculo faz com que o gás preencha esse espaço com mais velocidade e seja impulsionado a frente, essa seria uma explicação do efeito trampolim em para gases que têm sua extensão máxima em posições intermediárias.

4.2. Regressões Matemáticas e Modelagem

Os resultados das simulações realizadas foram importados para o *software* Matlab®. e, então foram realizadas análises de regressões do Design de experimentos a partir de modelos internos e sugeridos do programa. As análises de regressões por gás são mostradas a seguir. Para a avaliação da qualidade do ajuste, foi utilizado o coeficiente de determinação (r^2) o qual avalia as diferenças entre o modelo gerado e os pontos, quanto mais próximo de 1 o coeficiente, melhor o ajuste, melhor a equação proposta descreve o fenômeno proposto.

4.2.1. Extensão

A partir das regressões matemáticas, verificou-se que as melhores regressões foram geradas a partir da seguinte equação de terceira ordem. Sendo x a Posição do Obstáculo Normalizada (PON) e y o Raio do obstáculo Normalizado (RON).

$$EPN(x, y) = a + bx + cy + dx^2 + ey^2 + fxy + gx^3 + hy^3 + mx^2y + nxy^2 + px^3y + qx^2y^2 + rxy^3 \quad (10)$$

4.2.1.1. Concentração de 3%

A curva com a representação gráfica da regressão numérica para os três diferentes gases a uma concentração de 3% está disposta na figura 4.15.

A figura mostra como os pontos e a equação 10 se relacionam. Os parâmetros para a equação 10 para os diferentes gases estão dispostos na tabela 4.1, assim como os coeficientes de determinação, sendo x e y a Posição do Obstáculo Normalizada (PON) e o Raio do Obstáculo Normalizado (RON) respectivamente, os valores de R^2 indicam um bom fit entre os pontos e a equação encontrada.

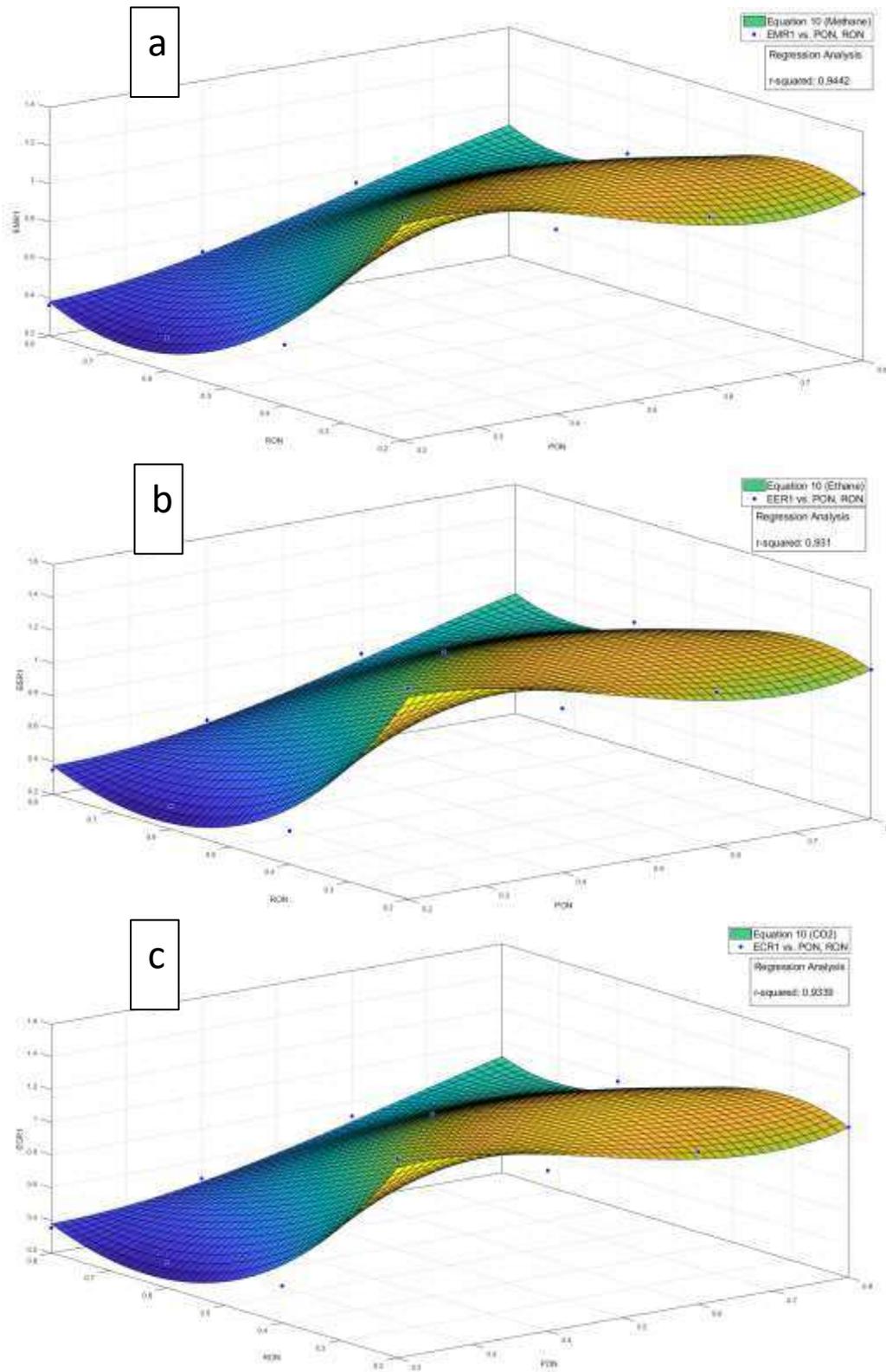
Em concordância com o que foi mostrado no tópico 4.1 a partir das análises estatísticas e curvas de contorno pode-se observar na figura 4.15 que os perfis dos três diferentes gases são de fato bem semelhantes e, de fato, o valor da extensão normalizada é maior para os casos em que tem-se raio e posição de obstáculos pequenos.

Tabela 4.1 - Coeficientes de Regressão para EPN dos diferentes gases a 3%

	a	b	c	d	e	f	g	h	m	n	p	q	r	R ²
CH ₄	3,56	-5,07	-16,5	-7,2	17,2	60,2	10,5	-1,8	-26,7	-80,9	-15,5	-49,8	15,2	0,944
C ₂ H ₆	4,79	-8,57	-24,1	-4,26	29,45	78,81	9,95	-7,54	-38,4	-105	-15,5	61,1	22,5	0,931
CO ₂	4,38	-7,55	-21,8	-4,7	25,98	73,7	9,69	-5,96	-35,8	-98,8	-14,3	57,6	20,8	0,934

Fonte: Do Autor (2022)

Figura 4.15 - Gráfico de PON x RON x EPN a 3%
a. Metano b. Etano c. CO2



Fonte: Do Autor (2022)

4.2.1.2. Concentração de 1,5%

Os parâmetros da regressão numérica e R^2 para os diferentes gases a uma concentração de 1,5% são apresentados a seguir, na tabela 4.2. A figura 4.16 mostra como são representadas as curvas geradas a partir da equação 10.

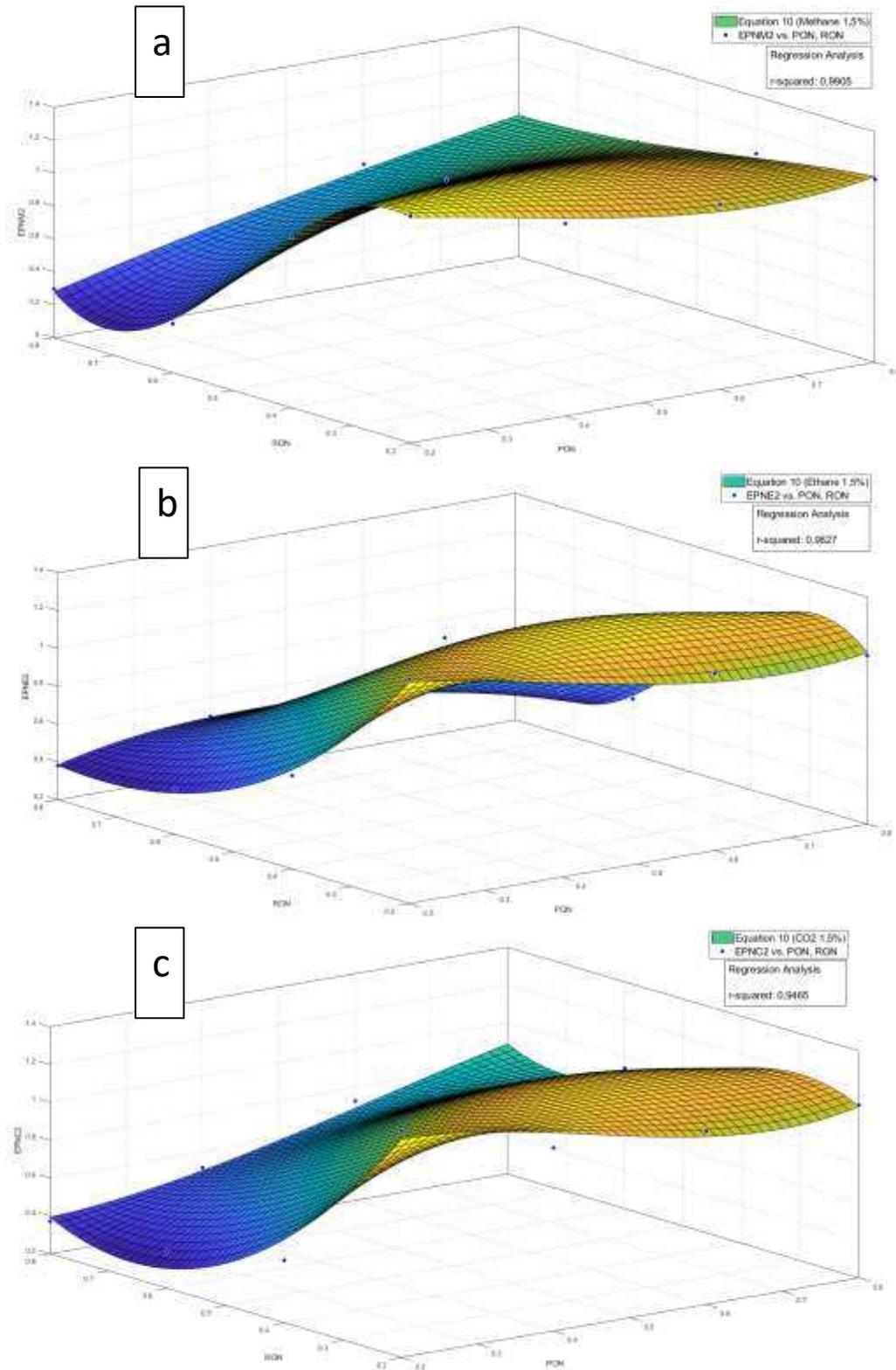
Verifica-se aqui também a semelhança com o que foi mostrado a partir das análises realizadas no minitab, valores baixos de RON e PON, que representam obstáculos pequenos e próximos ao vazamento, proporcionam extensões maiores, assim como valores baixos de PON e altos de RON, que representam obstáculos grandes e próximos ao vazamento, produzem extensões menores, nesse caso, o obstáculo funciona como uma parede, impedindo a dispersão da pluma de gás.

Tabela 4.2 - Coeficientes de Regressão para EPN dos diferentes gases a 1,5%

	a	b	c	d	e	f	g	h	m	n	p	q	r	R^2
CH ₄	0,84	-3,34	-8,99	-1,83	35,4	15,07	3,52	-28,6	-29,2	-15,7	-4,14	32,6	33,8	0,990
C ₂ H ₆	4,89	-13,7	-22,9	-6,51	28,8	94,4	2,72	-9,78	-60,8	-126	-0,88	57,3	41,8	0,983
CO ₂	3,96	-7,85	-17,6	-1,6	18,3	65,9	7,05	-2,3	-35,2	-84,8	-10,7	50,95	16,97	0,947

Fonte: Do Autor (2022)

Figura 4.16 - Gráfico de PON x RON x EPN a 1,5%
a. Metano b. Etano c. CO2



Fonte: Do Autor (2022)

4.2.1.3. Concentração de 0,75%

Os parâmetros da regressão numérica e R^2 para os diferentes gases a uma concentração de 0,75% são apresentados na tabela 4.3. A figura 4.17 mostra como são representadas as curvas geradas a partir da equação 10.

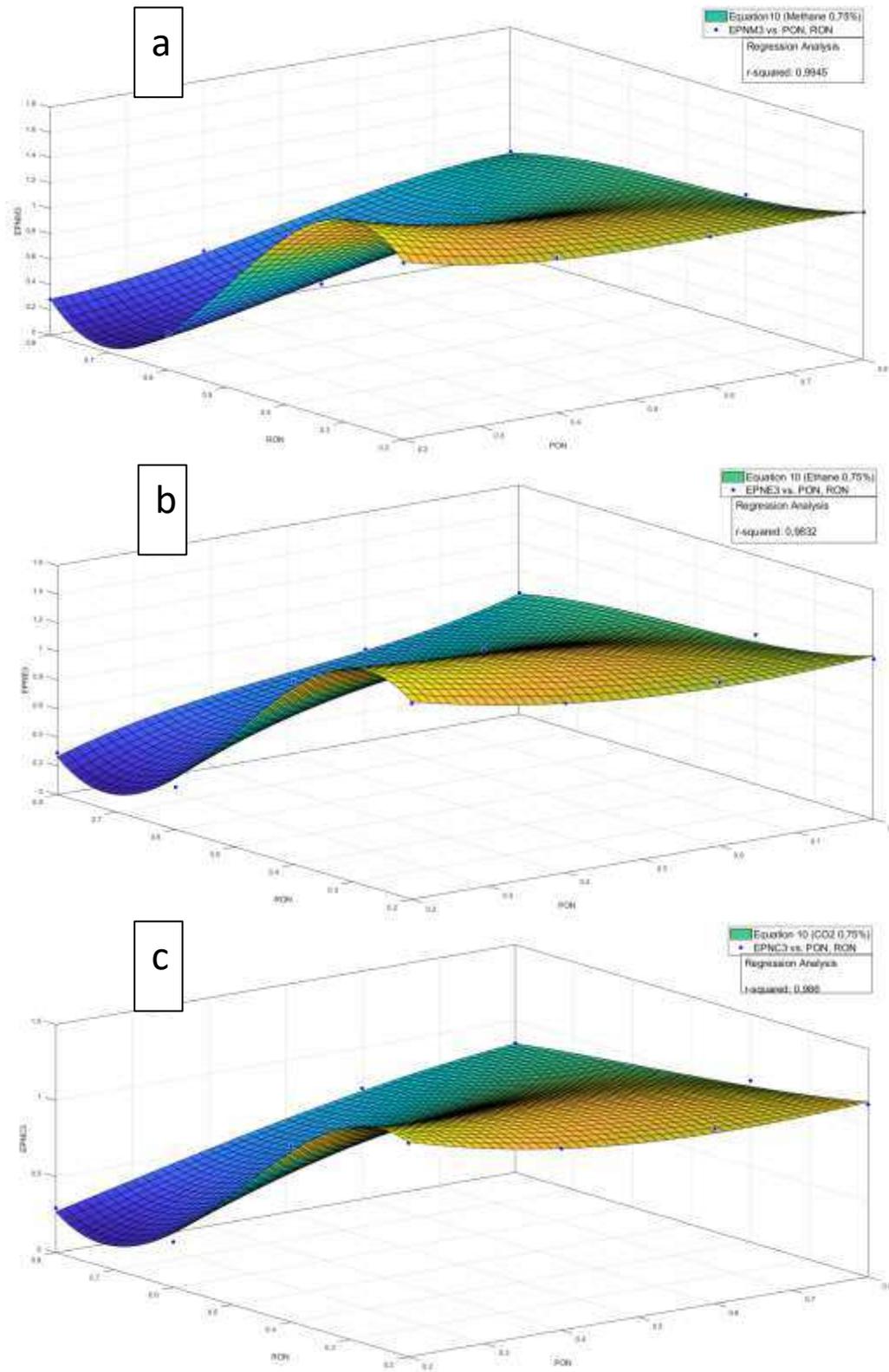
Para a extensão, pode-se também observar que houve uma boa concordância entre os pontos e as equações de modelo geradas, os perfis observados nos pontos anteriores ainda são evidentes, as extensões são máximas para pequenos raios normalizados e pequenas distâncias normalizadas entre obstáculo e vazamento.

Tabela 4.3 - Coeficientes de Regressão para EPN dos diferentes gases a 0,75%

	a	b	c	d	e	f	g	h	m	n	p	q	r	R^2
CH ₄	-1,88	0,81	32,9	6,65	-82,5	-40,3	-2,78	56,02	-5,49	107	-1,64	5,88	-75,7	0,994
C ₂ H ₆	-0,28	-3,71	20,2	8,98	-59,3	-1,67	-1,85	42,6	-39,9	59,6	-7,17	26,4	-57,5	0,983
CO ₂	0,79	-4,91	12,3	7,8	-42,1	6,31	-0,99	31,9	-29,5	34,3	-0,26	25,5	-41,1	0,986

Fonte: Do Autor (2022)

Figura 4.17 - Gráfico de PON x RON x EPN a 0,75%
a. Metano b. Etano c. CO2



Fonte: Do Autor (2022)

4.2.1. Volume

A partir das regressões matemáticas, verificou-se que as melhores regressões para o Volume da Pluma Normalizada foram geradas a partir da seguinte equação, sendo x a Posição do Obstáculo Normalizada (PON) e y o Raio do obstáculo Normalizado (RON).

$$VPN(x, y) = a + \frac{b}{x} + \frac{c}{y} + \frac{d}{xy} + \frac{ex^2}{y} + \frac{f}{y^2} + \frac{gy^2}{x^2} + h \left(\frac{x^2 + y^3}{x^2 + y^2} \right) + k \left(\frac{y^2}{x + y} \right) + l \left(\frac{x^2}{x + y} \right) \quad (11)$$

4.2.1.1. Concentração de 3%

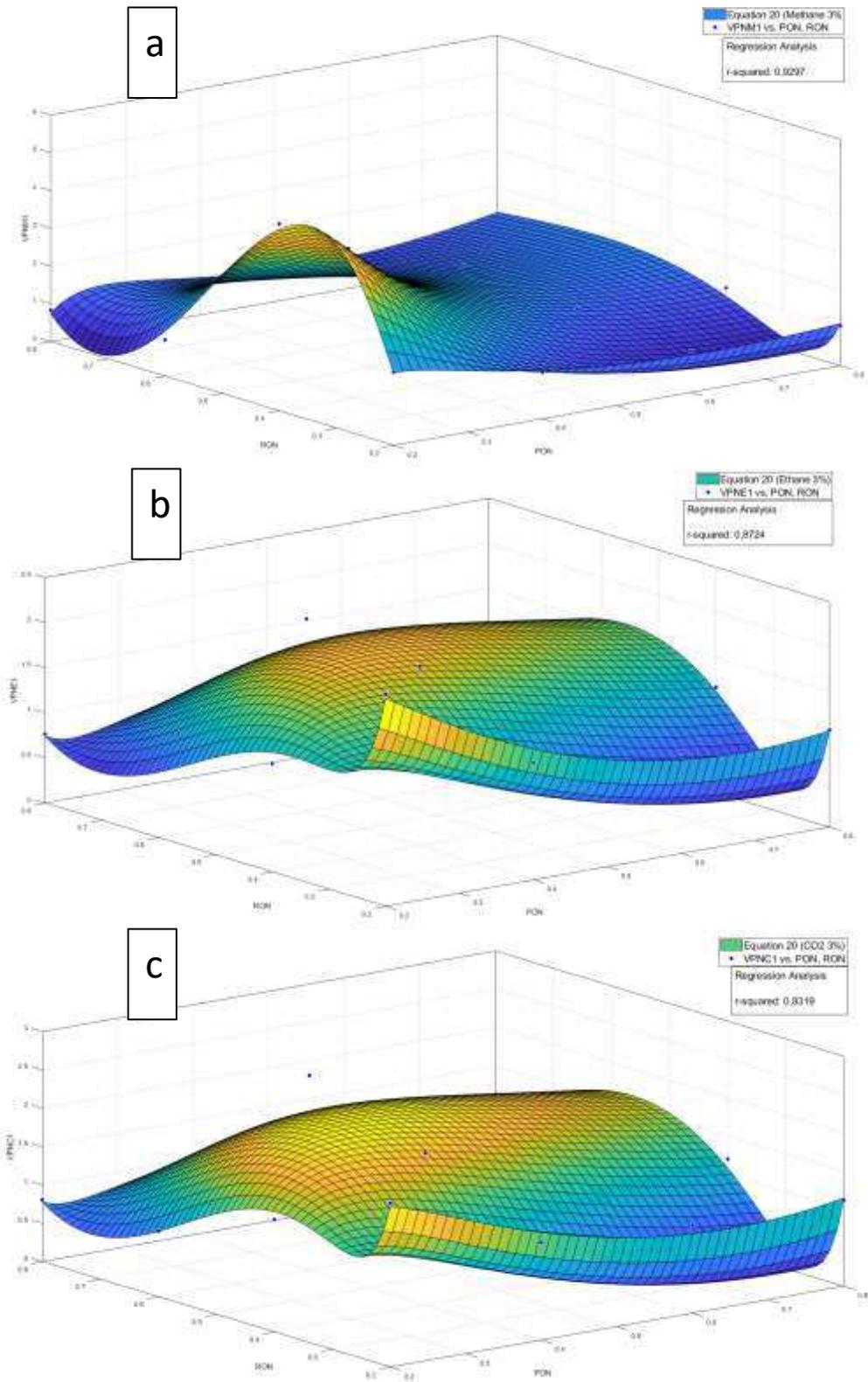
Na tabela 4.3 estão disponíveis os parâmetros da regressão matemática realizada para o Volume normalizado dos diferentes gases a uma concentração de 3%. Pode-se verificar as tendências vistas para a mesma concentração no tópico 4.1, as quais apresentam um volume maior para posições e raios normalizados em valores intermediários, fator que pode ser influência do perfil de velocidade dos gases no ponto de impacto, caso a velocidade se a velocidade máxima da dispersão não for próxima o ponto de impacto, ela não gerará uma condição na qual o volume após a colisão seja máximo, pois não haverá a quebra de momento tão alta como em outra situação.

Tabela 4.4 - Coeficientes de Regressão para VPN dos diferentes gases a 3%

	a	b	c	d	e	f	g	h	m	n	R ²
CH ₄	8,44	8,28	-6,46	-1,34	-0,26	0,98	4,34	4,90	-7,2	-1,93	0,930
C ₂ H ₆	22,29	0,05	-7,28	0,05	0,79	0,765	-0,66	1,21	-3,30	-6,80	0,872
CO ₂	25,51	0,67	-8,73	-0,07	0,89	0,95	-0,95	1,59	-4,16	-7,74	0,832

Fonte: Do Autor (2022)

Figura 4.18 - Gráfico de PON x RON xVPN a 3%
a. Metano b. Etano c. CO2



Fonte: Do Autor (2022)

4.2.1.2. Concentração de 1,5%

Ao analisarem-se as curvas geradas para os diferentes gases à concentração de 1,5%, presentes na figura 4.19, pode-se observar a semelhança entre os três diferentes perfis, há uma região entre 0,2 e 0,4 RON e baixas posições normalizadas de obstáculo que causam valores máximos de volume da pluma, fenômeno já observado no tópico 4.1.

A tabela 4.5. apresenta os coeficientes de regressão e R^2 para as relações geradas, os valores de R^2 são um indicador de que há uma boa concordância entre os dados e a relação matemática gerada.

Tabela 4.5 - Coeficientes de Regressão para VPN dos diferentes gases a 1,5%

	a	b	c	d	e	f	g	h	m	n	R^2
CH ₄	8,54	5,31	-5,05	-0,84	-0,13	0,72	-3,01	3,48	-5,28	-1,99	0,928
C ₂ H ₈	0,264	5,4	-2,18	-0,86	-0,42	0,408	-2,46	2,67	-4,1	0,884	0,970 2
CO ₂	5,78	8,15	-5,44	-1,31	-0,36	0,86	-4,15	4,64	-6,8	-0,98	0,939

Fonte: Do Autor (2022)

4.2.1.1. Concentração de 0,75%

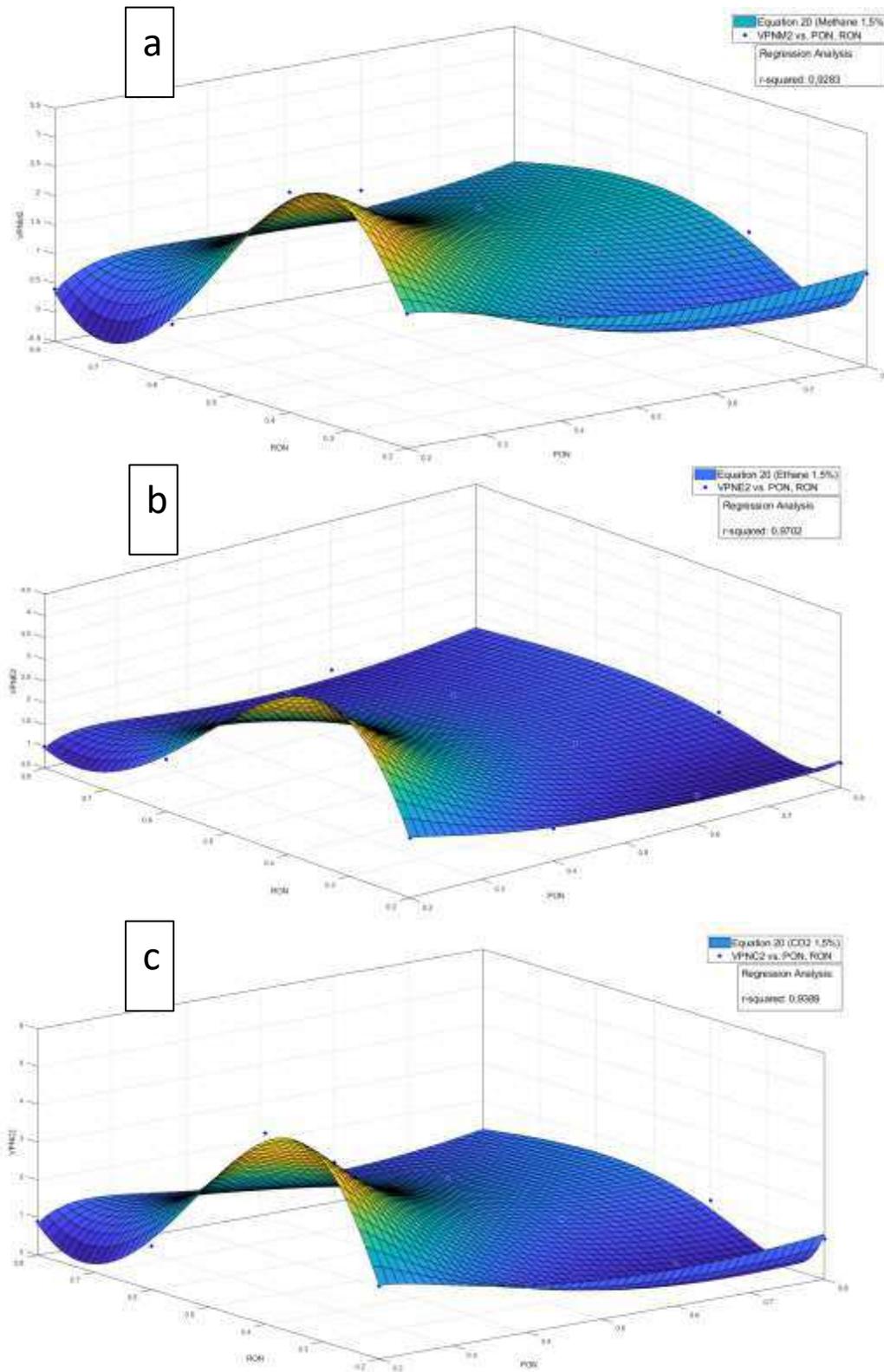
Para uma concentração de 0,75% estão representadas as curvas por meio da figura 4.20, aqui, pode-se também observar a semelhança entre os efeitos dos diferentes gases, a região de máximo volume é a mesma para os três, assim como a de mínimo, o qual acontece para grandes raios normalizados e pequenas distancias normalizadas entre obstáculo e vazamento.

A tabela 4.6 mostra os parâmetros de regressão e R^2 para o atual caso, aqui, também observa-se uma boa concordância entre os pontos e o modelo gerado.

Figura 4.19 - Coeficientes de Regressão para VPN dos diferentes gases a 0,75%

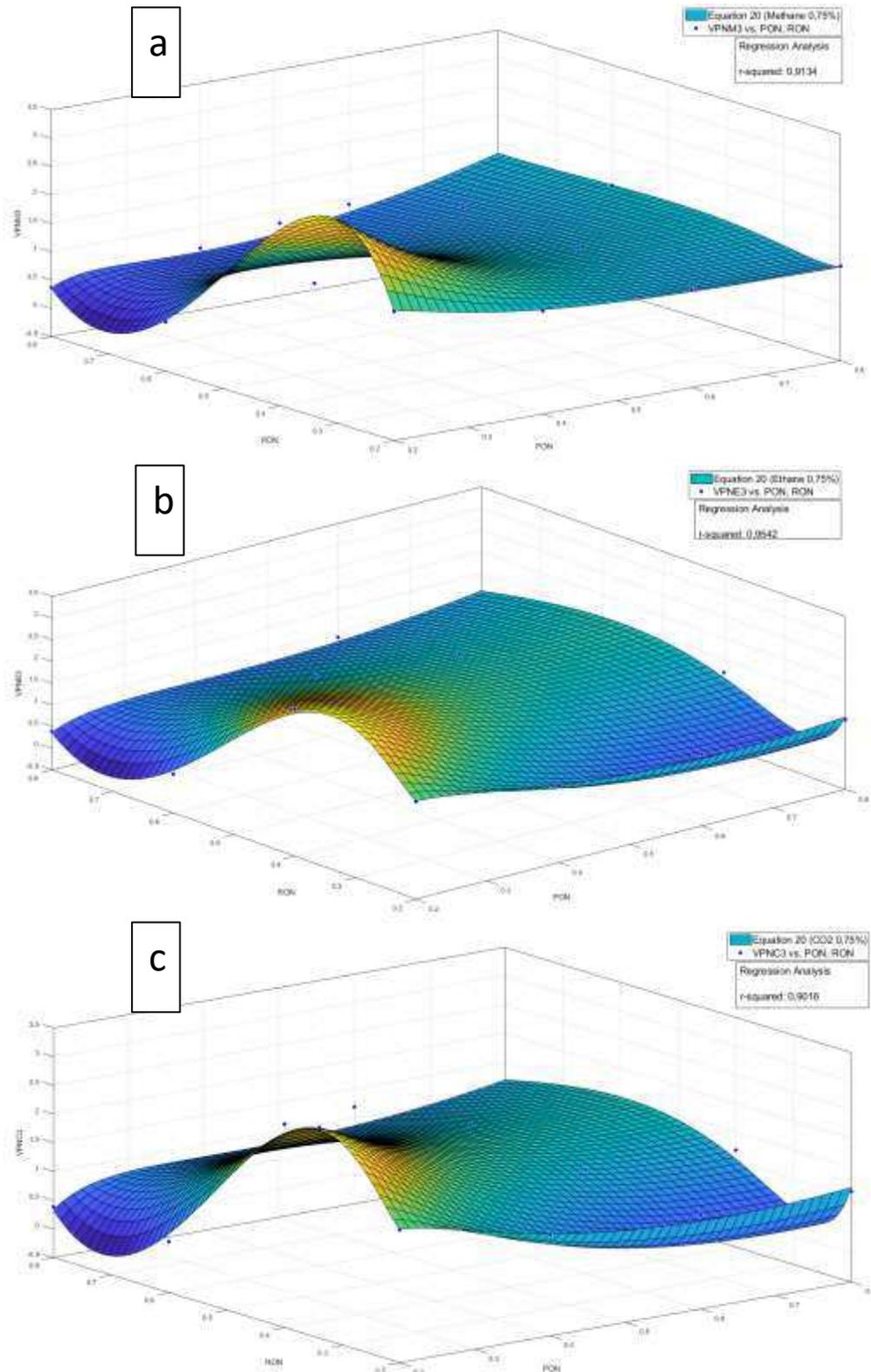
	a	b	c	d	e	f	g	h	m	n	R ²
CH ₄	-4,36	4,08	0,06	-0,63	-0,67	0,12	-2,11	2,35	-3,12	-2,5	0,913
C ₂ H ₆	9,33	4,55	-4,95	-0,72	-0,08	0,68	-2,61	3,10	-5,01	-2,16	0,954
CO ₂	8,78	4,74	-4,95	-0,74	-0,10	0,694	-2,68	3,14	-4,94	-1,93	0,902

Figura 4.20 - Gráfico de PON x RON x VPN a 1,5%
a. Metano b. Etano c. CO2



Fonte: Do Autor (2022)

Figura 4.21 - Gráfico de PON x RON x VPN a 0,75%
a. Metano b. Etano c. CO2



Fonte: Do Autor (2022)

4.2.2. Combinação de Gases

Foi realizada a combinação dos gases num único gráfico para análise dos perfis. A análise é necessária para avaliar a sobreposição das curvas, caso não haja uma, será necessário realizar uma normalização adicional, a intenção é que as curvas fiquem sobrepostas de modo que consiga-se descrever o fenômeno de diferentes gases por uma mesma equação.

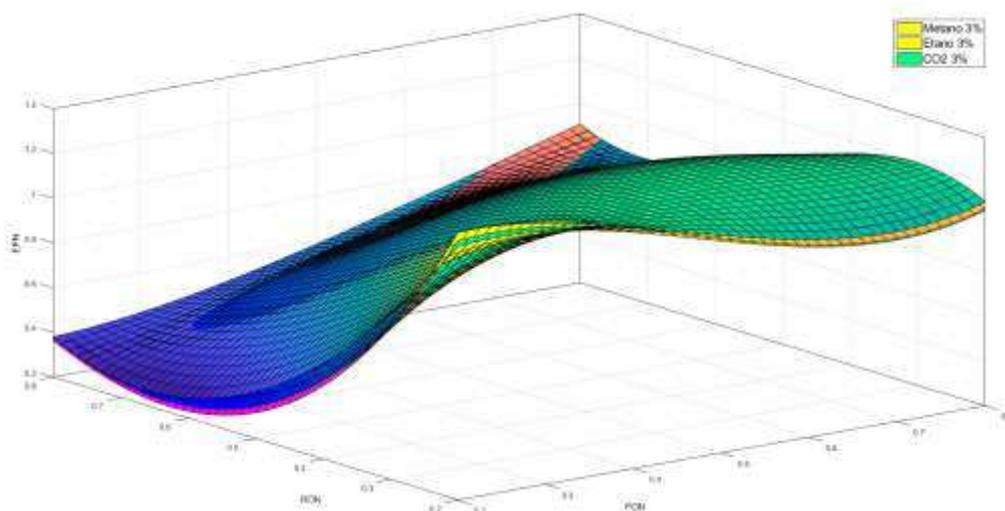
4.2.2.1. Extensão

A seguir, nas figuras de 4.22 a 4.24, estão dispostas as combinações das curvas dos gases em um mesmo gráfico, a fim de analisarem-se as semelhanças e proximidades entre elas.

A. Concentração de 3%

A figura 4.22 representa como as curvas dos 3 diferentes gases ficam dispostas num mesmo gráfico. Pode-se observar que há uma sobreposição das três, a diferença média entre as três curvas é de 2%.

Figura 4.22 - Gráfico de PON x RON x EPN (Todos os Gases 3%)

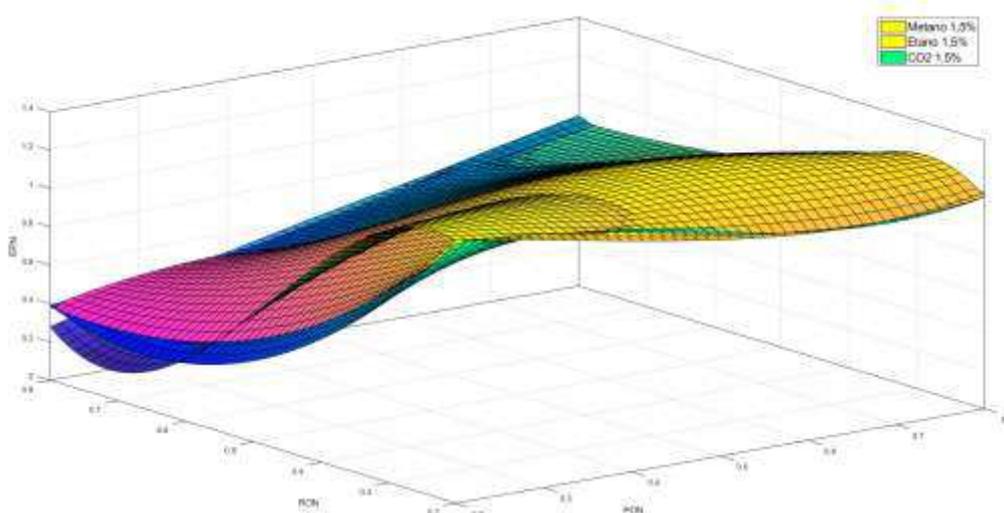


Fonte: Do Autor (2022)

B. Concentração de 1,5%

Na figura 4.23 estão representadas as curvas dos diferentes gases para uma concentração de 1,5%. Nesse caso, também há uma proximidade entre as curvas e a diferença média entre elas é de 5%.

Figura 4.23 - Gráfico de PON x RON x EPN (Todos os Gases 1,5%)

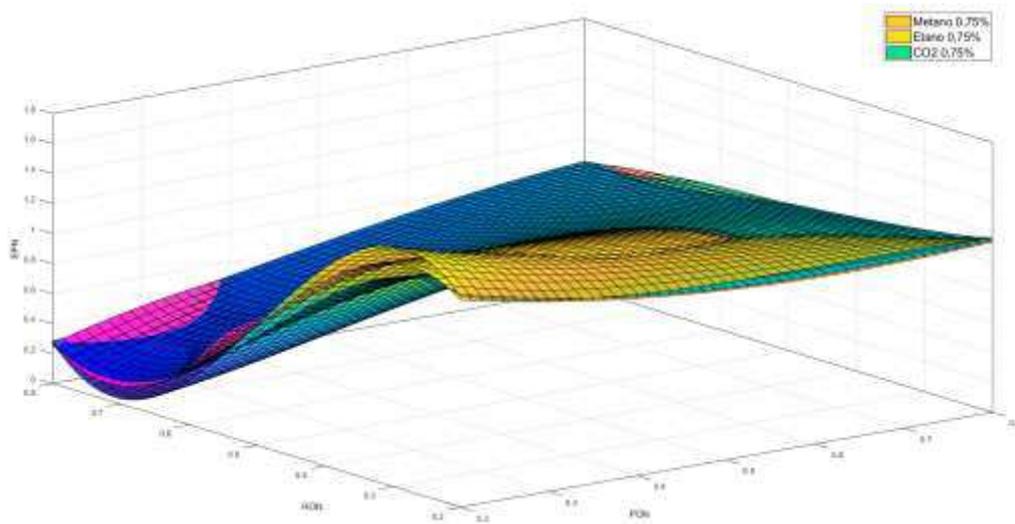


Fonte: Do Autor (2022)

C. Concentração de 0,75%

Na figura 4.24 por fim estão apresentadas as curvas dos diferentes gases à concentração de 0,75%, verifica-se a semelhança entre os perfis dos três gases e a sobreposição dos pontos a depender da região, os três têm as mesmas regiões de máximo e mínimo, sendo a diferença média entre as curvas de 5%

Figura 4.24 - Gráfico de PON x RON x EPN (Todos os Gases 0,75%)



Fonte: Do Autor (2022)

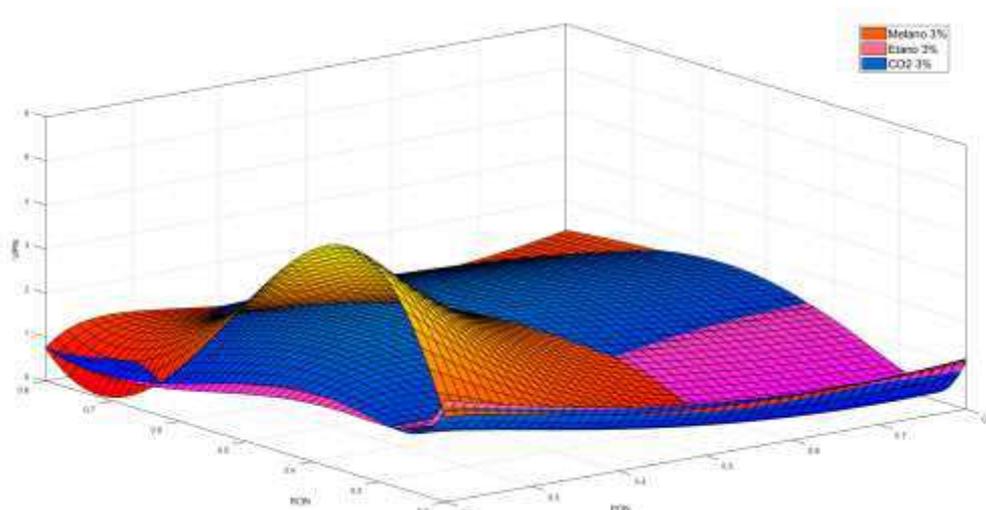
4.2.2.2. Volume

As figuras 4.25 a 4.27 estão apresentadas as curvas dos 3 gases em um mesmo gráfico, aqui, deseja-se analisar as diferenças entre os perfis e as distâncias médias entre as curvas.

A. Concentração de 3%

À concentração de 3%, pode-se observar a diferença que os perfis dos três gases têm, ao serem colocados em um mesmo ponto. Novamente, a diferença entre as três curvas se dá à diferença do perfil de dispersão dos gases à concentração de estudo, no caso atual, acredita-se que o perfil velocidade e o momento do gás ao encontrar o obstáculo são determinantes para gerar os diferentes perfis evidenciados na figura, aqui, a diferença média entre as curvas é de 15%.

Figura 4.25 - Gráfico de PON x RON x VPN (Todos os Gases 3%)

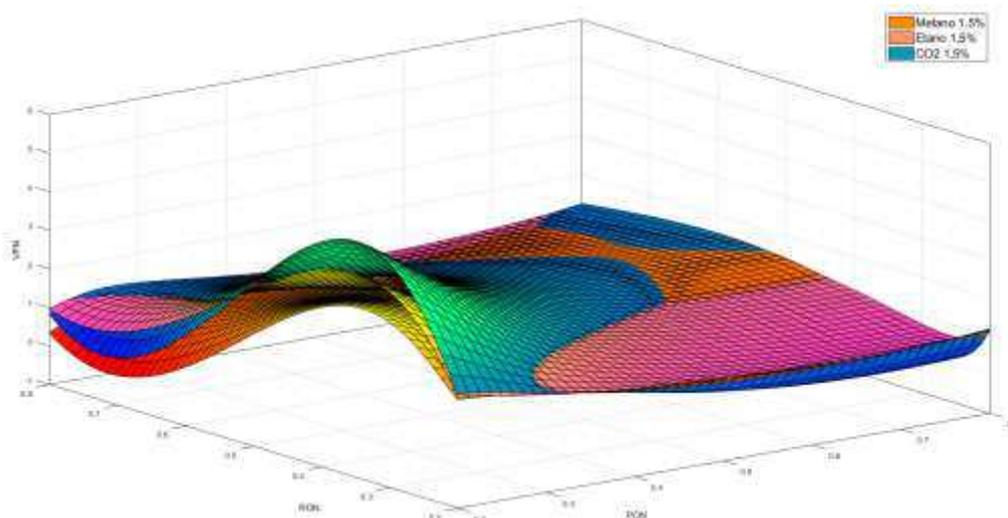


Fonte: Do Autor (2022)

B. Concentração de 1,5%

À concentração de 1,5%, na figura 4.26 observa-se um perfil diferente do anterior, no caso atual, as três curvas têm perfis semelhantes, com mesmas regiões de máximo e mínimo, entretanto, pode-se observar que há um *offset* entre as curvas, a diferença média entre elas é de 15%

Figura 4.26 - Gráfico de PON x RON x VPN (Todos os Gases 1,5%)

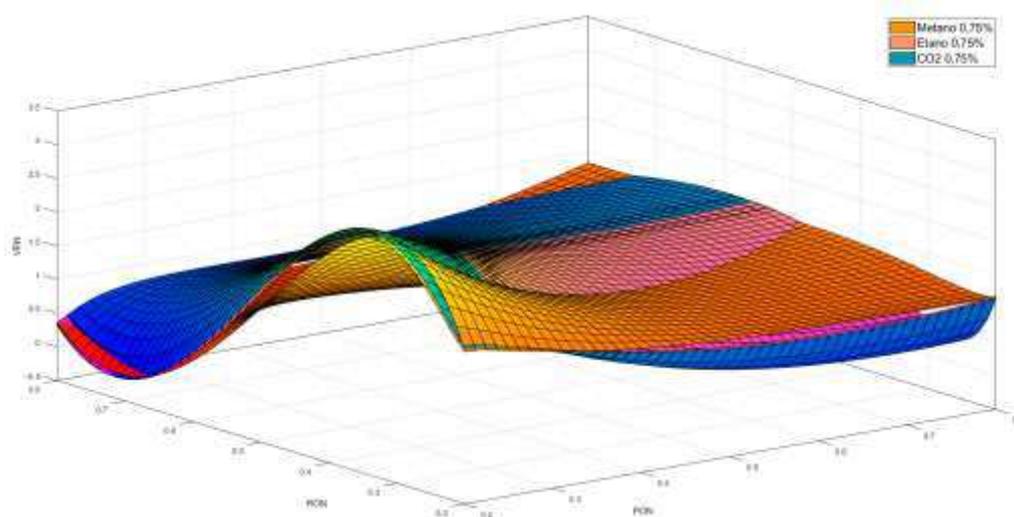


Fonte: Do Autor (2022)

C. Concentração de 0,75%

A figura 4.27 representa, para o volume normalizado, a uma concentração de 0,75% como as curvas dos três gases de estudo se apresentam. Nesse caso, observa-se uma proximidade entre as três curvas, maior que no ponto B., a diferença média entre as curvas é de 5%

Figura 4.27 - Gráfico de PON x RON x VPN (Todos os Gases 0,75%)



Fonte: Do Autor (2022)

4.3. Fator de correção por Componente

Um fator de correção adicional teve de ser adicionado às regressões. Pelo fato de que os diferentes gases tinham comportamentos semelhantes mas, há ainda um *offset* entre as curvas, vide Figuras 4.25, 4.26 e 4.27. O fator de correção foi aplicado para que houvesse uma aproximação entre as curvas e os diferentes modelos pudessem, futuramente, serem descritos por uma única equação que fosse capaz de dar, de maneira aproximada, os fenômenos dos diferentes gases. O fator de correção pode ser descrito pela equação 30.

$$FC_G = \frac{\sum_1^n \left(\frac{GPN_G(i)}{GPN_R(i)} \right)}{n} \quad (12)$$

Sendo GPN_G a grandeza da pluma normalizada do gás em questão, GPN_R a grandeza da pluma normalizada do gás de referência (No presente estudo foi considerado o Metano como gás de referência). A grandeza em questão pode

ser tanto Volume quanto Extensão. Após ser realizado o cálculo do fator de correção, é realizada a multiplicação do fator de correção pela grandeza em questão, tendo então o valor corrigido, descrito pela equação a seguir.

$$GC_G = FC_G \times GPN_G \quad (13)$$

Sendo então GC_G a grandeza corrigida do gás (podendo ser extensão ou volume).

4.3.1. Combinação dos Gases com Valores Corrigidos

Para ilustrar os efeitos mencionados no tópico 4.2, podem-se plotar as curvas dos diferentes gases em um mesmo gráfico. Pode-se observar que, como esperado, foi reduzido o *offset* entre as curvas, aproximando-as ao comparar as figuras 4.31, 4.32 e 4.33 com 4.25, 4.26 e 4.27 . O resultado é apresentado a seguir:

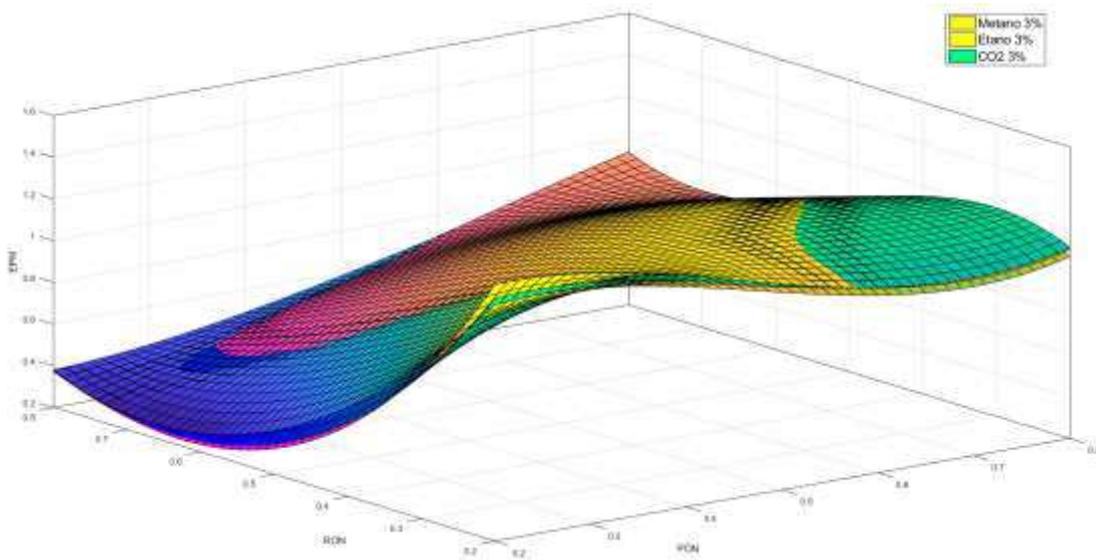
4.3.1.1. Extensão

A seguir estão as curvas de extensão corrigida dos três diferentes gases, às diferentes concentrações, assim como as diferenças médias entre as curvas corrigidas.

A. Concentração de 3%

A figura 4.28 representa a combinação dos diferentes gases em um mesmo gráfico, para a extensão da pluma normalizada, a 3%, todos os gases passaram pelo fator de correção, aqui, a diferença média entre eles é de menos de 1%.

Figura 4.28 - Gráfico de PON x RON x EPN (Todos os Gases Corrigidos 3%)

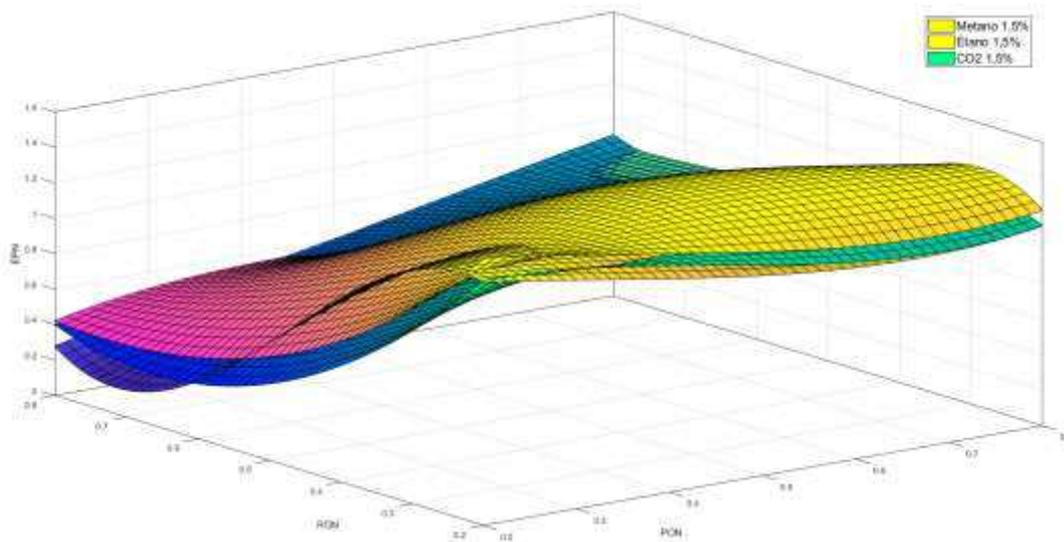


Fonte: Do Autor (2022)

B. Concentração de 1,5%

Para a combinação dos diferentes gases corrigidos a uma concentração de 1,5%, a diferença média entre as curvas foi de 1%.

Figura 4.29 - Gráfico de PON x RON x EPN (Todos os Gases Corrigidos 1,5%)

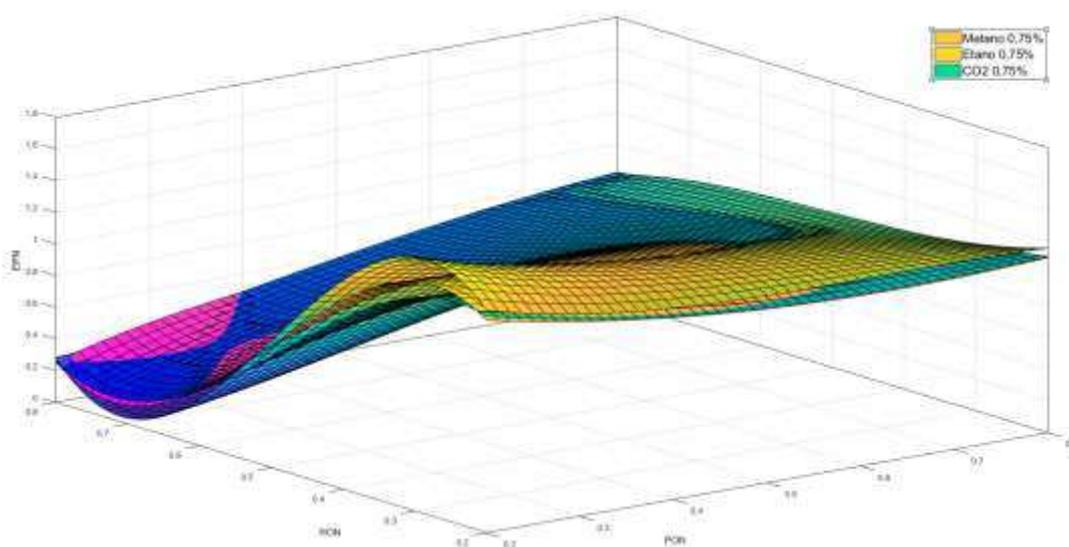


Fonte: Do Autor (2022)

C. Concentração de 0,75%

Para a combinação dos gases a uma concentração de 0,75%, a figura 4.30 apresenta em um gráfico como as três curvas estão dispostas. A diferença média entre as curvas foi de 3%

Figura 4.30 - Gráfico de PON x RON x EPN (Todos os Gases Corrigidos 0,75%)



Fonte: Do Autor (2022)

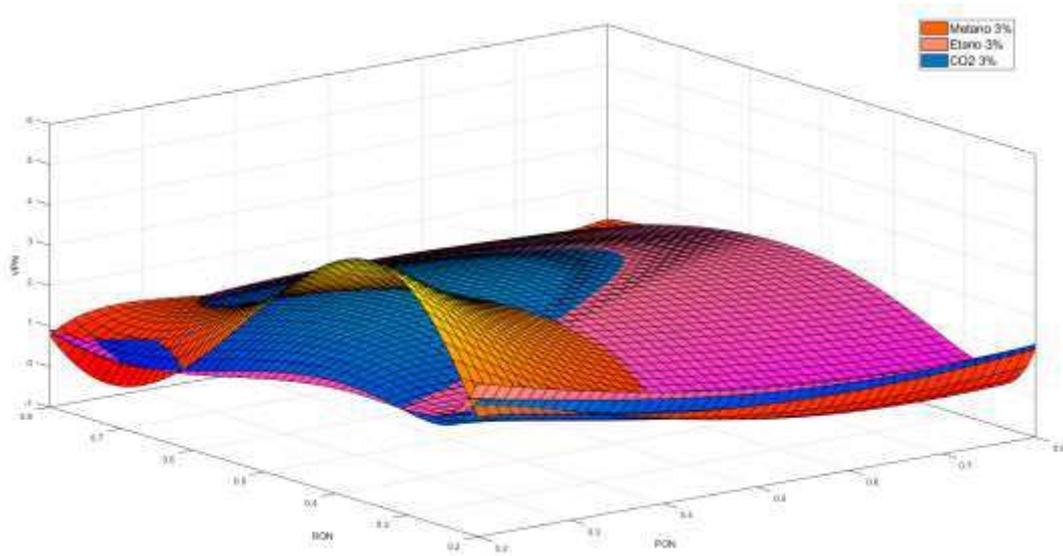
4.3.1.2. Volume

A seguir estão dispostas as sobreposições de curvas de Volume corrigido para as diferentes concentrações, assim como as diferenças médias entre as curvas.

A. Concentração de 3%

A figura 4.31 apresenta como estão as diferentes curvas de extensão corrigida a uma concentração de 3%, observa-se que qualitativamente houve uma aproximação entre as três curvas, aqui, a diferença média entre as curvas foi de 10%.

Figura 4.31 - Gráfico de PON x RON x VPN (Todos os Gases Corrigidos 3%)

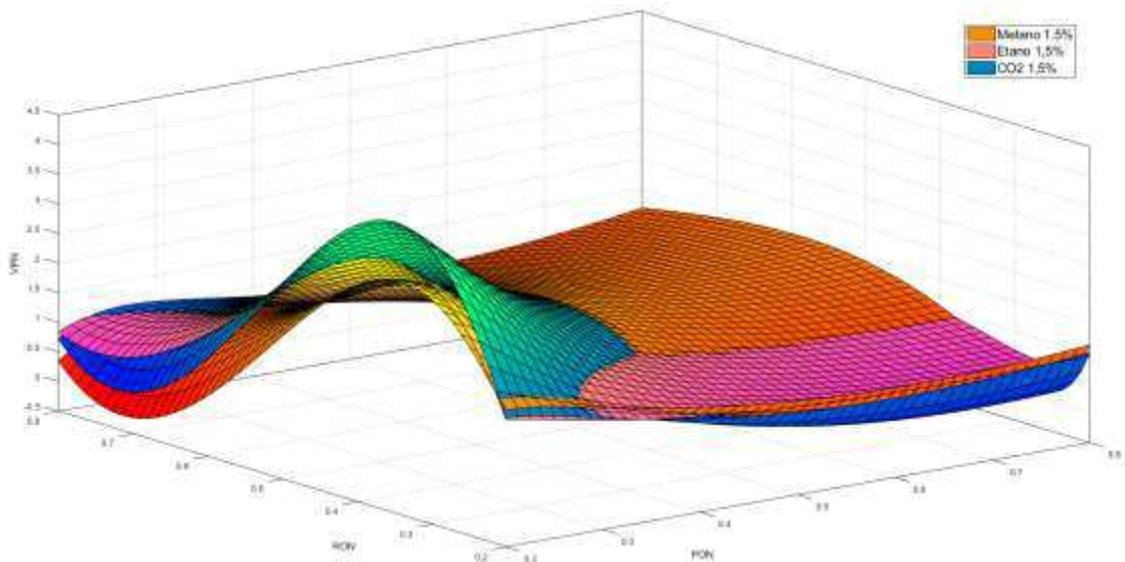


Fonte: Do Autor (2022)

B. Concentração de 1,5%

Para a figura 4.32, também pode-se observar qualitativamente a aproximação entre as curvas, nesse caso, a diferença média entre as curvas caiu para 3%.

Figura 4.32 - Gráfico de PON x RON x VPN (Todos os Gases Corrigidos 1,5%)

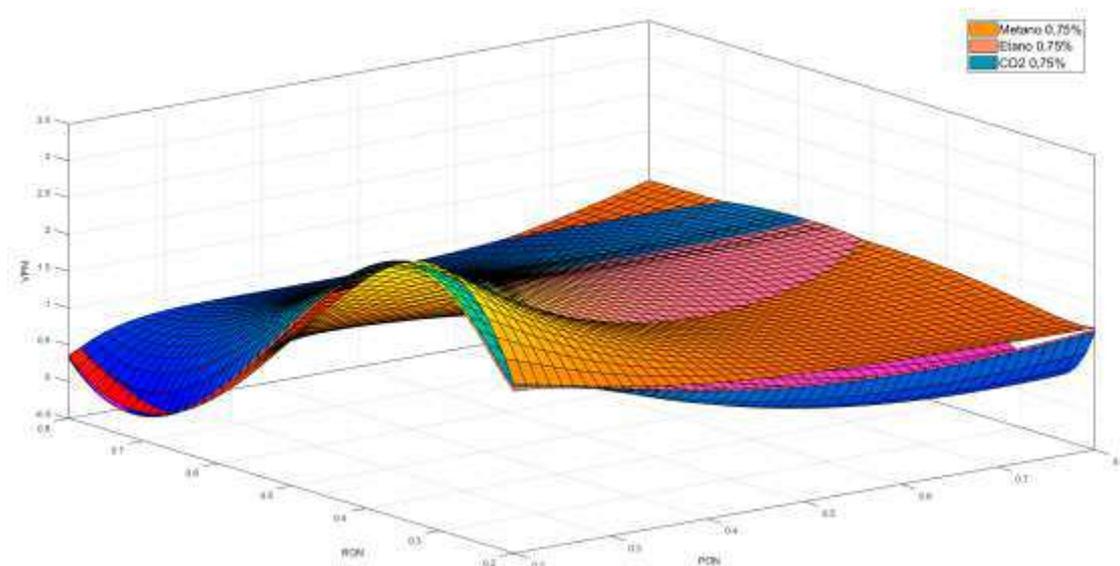


Fonte: Do Autor (2022)

C. Concentração de 0,75%

Por fim, para os diferentes gases corrigidos a uma concentração de 0,75%, verifica-se que aqui há uma aproximação também entre as curvas, tendo sido reduzido o *offset* antes presente, a diferença média entre as curvas é de 1%.

Figura 4.33 - Gráfico de PON x RON x VPN (Todos os Gases Corrigidos 0,75%)



Fonte: Do Autor (2022)

4.4. Modelo Proposto

Realizadas as regressões matemáticas e as normalizações, agora, é necessário que seja gerado um modelo matemático unificado por concentração o qual possa ajudar a descrever os fenômenos dos diferentes gases por uma mesma equação. Dessa forma, uma maneira proposta de gerar tal modelo matemático foi de que ele representasse, inicialmente, uma média entre os diferentes gases.

Foram utilizados os pontos já existentes dos diferentes gases para gerar os pontos do modelo proposto e subsequentemente realizar a regressão do mesmo. A seguir está a equação utilizada para a geração dos pontos do modelo proposto.

$$EM\% = \frac{\sum_1^n EC_G(i)\%}{n} \quad (14)$$

$$VM\% = \frac{\sum_1^n VC_G(i)\%}{n} \quad (15)$$

Em suma, a Extensão ou volume do dado modelo médio a uma concentração será a média das extensões ou volumes corrigidos à concentração desejada.

4.4.1. Extensão

Munidos dos dados de uma extensão para o modelo médio, foram gerados parâmetros dos modelos para as extensões às diferentes concentrações e plotados com os diferentes gases com suas grandezas corrigidas. A tabela 4.6 traz os parâmetros do modelo matemático gerado, e a figura 4.34 traz como as curvas e o modelo proposto se apresentam num mesmo gráfico.

Tabela 4.6 - Coeficientes de Regressão para EPC do modelo proposto às diferentes concentrações

	a	b	c	d	e	f	g	h	m	n	p	q	r	R²
3%	4,29	-7,14	-21	-5,42	24,5	71,6	10,2	-5,16	-34	-96	-15,1	56,7	19,75	0,94
1,5%	3,42	-8,81	-11,4	2,45	4,95	62,02	4,57	5,17	-44	-69,6	-4,7	49,2	9,79	0,99
0,75%	-0,44	-2,5	-21,5	7,65	-60,3	-12	-1,86	42,8	-24,2	66	1,86	18,74	-57,1	0,99

Fonte: Do Autor (2022)

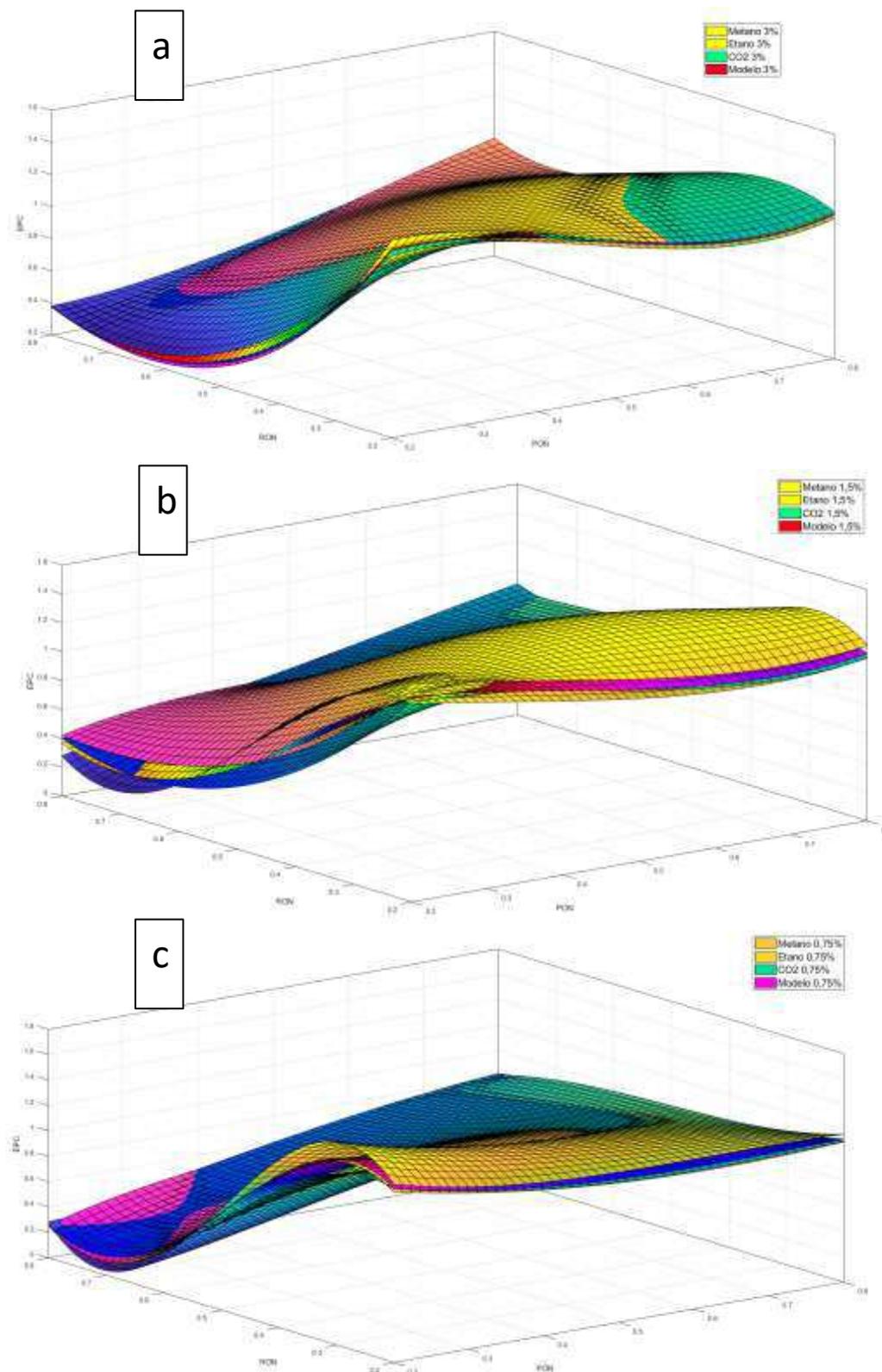
Na figura 4.34 pode-se observar como o modelo gerado (rosa) se correlaciona com os diferentes gases, pode-se verificar que há uma superposição entre todos os gases e o modelo, aqui, a diferença média entre as curvas é apresentada na tabela 4.7.

Tabela 4.7 - Diferenças médias entre o modelo e as curvas para a Extensão

Concentração	Diferença Média entre Modelo e Curvas
3%	0,15%
1,5%	1%
0,75%	0,5%

Fonte: Do Autor (2022)

Figura 4.34 - Gráfico de PON x RON x EPC - Modelo e os diferentes gases
a. 3% b. 1,5% c. 0,75%



Fonte: Do Autor (2022)

4.4.2. Volume

Analogamente ao que foi feito para a Extensão corrigida, para o volume foram realizadas as correções dos diferentes gases e gerado um modelo proposto. A tabela 4.8 apresenta os parâmetros do modelo gerado às diferentes concentrações.

Ainda, a figura 4.35, ilustra como as curvas já existentes e o modelo proposto se correlacionam. Verifica-se que, além dos valores corrigidos, o modelo proposto fica entre as curvas dos diferentes gases, fazendo com que fique próximo dos pontos de todos os gases, fato que faz com que as diferenças médias entre modelo e diferentes gases sejam baixas.

Tabela 4.8 - Coeficientes de Regressão para VPC do modelo proposto às diferentes concentrações

	a	b	c	d	e	f	g	h	m	n	R²
3%	21,4	3,03	-8,38	-0,45	0,57	0,99	-2,07	2,72	-5,30	-6,31	0,91
1,5%	4,58	5,69	-3,882	-0,91	-0,27	0,61	-2,91	3,27	-4,91	-0,69	0,95
0,75%	4,36	4,34	-3,16	-0,68	-0,28	0,48	-2,4	2,79	-4,23	-0,47	0,96

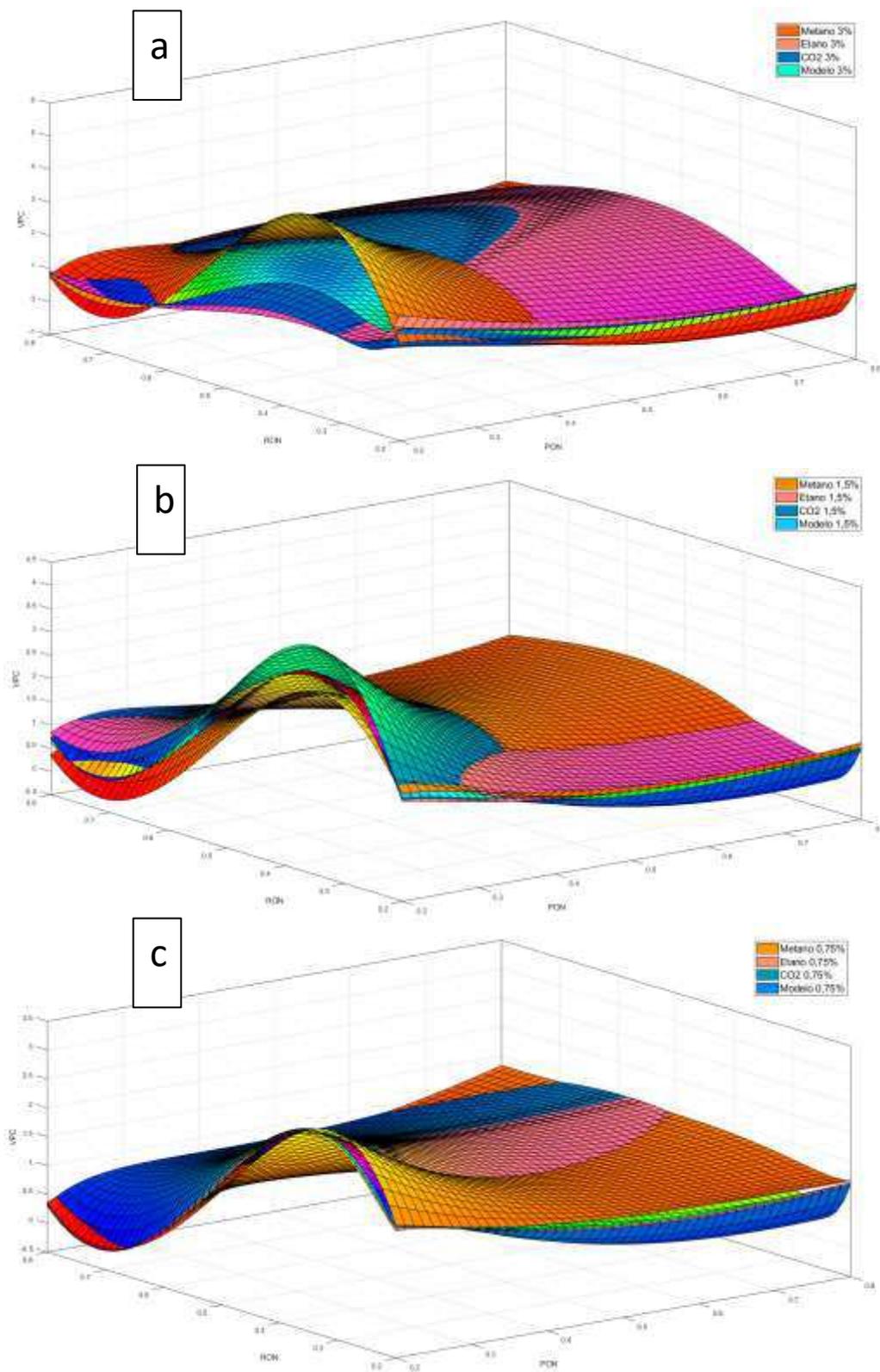
Fonte: Do Autor (2022)

Tabela 4.9 - Diferenças médias entre o modelo e as curvas para o Volume

Concentração	Diferença Média entre Modelo e Curvas
3%	5%
1,5%	2%
0,75%	0,7%

Fonte: Do Autor (2022)

Figura 4.35 - Gráfico de PON x RON x VPC - Modelo e os diferentes gases
a. 3% b. 1,5% c. 0,75%



Fonte: Do Autor (2022)

4.5. Apanhado de Regressões Numéricas

As tabelas a seguir ilustram todas as informações dos coeficientes de regressão (Tabelas 4.10 a 4.13). Como mencionado no tópico 4.2, quanto mais próximo o coeficiente de regressão da unidade, melhor o ajuste entre pontos e modelo.

Tabela 4.10 - Coeficientes de Regressão para o Gás Metano

Metano		
Extensão		
3%	1,50%	0,75%
0,944	0,991	0,994
Volume		
3%	1,50%	0,75%
0,930	0,928	0,913

Fonte: Do Autor (2022)

Tabela 4.11 - Coeficientes de Regressão para o Gás Etano

Etano		
Extensão		
3%	1,50%	0,75%
0,931	0,983	0,983
Volume		
3%	1,50%	0,75%
0,872	0,970	0,954

Fonte: Do Autor (2022)

Tabela 4.12 - Coeficientes de Regressão para o Gás Carbônico

Gás Carbônico		
Extensão		
3%	1,50%	0,75%
0,934	0,946	0,986

Volume		
3%	1,50%	0,75%
0,832	0,939	0,902

Fonte: Do Autor (2022)

Tabela 4.13 - Coeficientes de Regressão para o Modelo Proposto

Modelo Proposto		
Extensão		
3%	1,50%	0,75%
0,936	0,985	0,993
Volume		
3%	1,50%	0,75%
0,906	0,946	0,96

Fonte: Do Autor (2022)

5. CONCLUSÕES

No presente trabalho foi verificada a influência de um obstáculo numa dispersão gasosa por meio de simulações em fluidodinâmica computacional. A partir dos resultados coletados foi possível observar como variam extensão e volume das plumas de gás com relação às suas interações com obstáculos. Observou-se que a extensão varia de acordo com uma equação de terceira ordem da posição e raio de obstáculos, e têm perfis semelhantes para os diferentes gases. O volume varia como uma equação de segunda ordem, composta de potências, razões e combinações entre as variáveis.

Verificou-se também a influência que o perfil velocidade máxima do gás tem na dispersão gasosa, foi possível observar que, quando o gás não tinha totalmente desenvolvido sua velocidade máxima e encontrava o obstáculo, gerava um diferente perfil de dispersão e conseqüentemente outra relação entre extensão e volume máximos. Observou-se também o efeito conhecido na literatura como trampolim, no qual, ao invés de reduzir a distância máxima de dispersão de uma pluma gasosa, o obstáculo influencia fazendo com que a distância máxima da dispersão seja maior do que a do jato livre.

Verificou-se também a diferença na afirmação da norma IEC - 60079-10-1-2015, a qual informa que, de maneira geral, uma dispersão gasosa ao ser influenciada por um obstáculo tende a ter um aumento de quase o dobro de sua extensão normal. Mostrou-se que nem sempre tal afirmação é verdadeira e verificou-se diferentes condições de distância e raio de obstáculos para os quais existe um aumento ou diminuição da extensão e volume.

Ainda, foi possível verificar a semelhança entre os perfis de extensão e volume normalizado para os diferentes gases analisados, o que leva a acreditar que, dadas as condições das simulações realizadas, outros gases de características semelhantes também poderiam ser descritos pelas equações aqui propostas, sujeito a validação.

Foram gerados modelos por gás e concentração tanto de volume e extensão e, em geral, tiveram boas concordâncias entre os pontos e as equações propostas, tal resultado pode possibilitar o cálculo individualizado de extensão e volume por componente a uma dada concentração.

Foram gerados também modelos unificados baseados nos gases de estudo para volume e extensão corrigidas, verificou-se que os modelos têm boa aderência entre os pontos e a equação gerada, com coeficientes de determinação próximos de 1, foram observadas baixas diferenças médias entre os modelos dos gases individuais e o modelo proposto, o que sugere um bom ponto inicial para o estudo da influência de obstáculos em vazamentos gasosos pressurizados, além da possibilidade da utilização do modelo unificado ao invés de uma equação específica por gás.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANSYS CFX - Solver Theory Guide. (2015). ANSYS Inc., Canonsburg, United States.
- ALLEN, J. T. Laser Based Measurements in Two-phase Flashing Propane Jets. Part One: Velocity profiles. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 11, p. 291-297, 1998a.
- ANGERS, B. et al. Numerical Investigation of a Vertical surface on the Flammable Extent of Hydrogen and Methane vertical Jets. **International Conference on Hydrogen Safety**, p. 1-8, 2011.
- BAOUABE, I. B. et al. Assessment of a Chimney Jet Flowing Around an Obstacle. **Heat Transfer Engineering**, v. 33, n. 10, p. 885-904, 2012.
- BÉNARD, P. et al. Adjacent surface effect on the flammable cloud of hydrogen and methane jets: Numerical investigation and engineering correlations. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 41, p. 18654-18662, 2016.
- BENINTENDI, R. Turbulent Jet Modeling for hazardous area classification. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 23, p. 373-378, 2010.
- BUSINI, V.; LINO, M.; ROTA, R. Influence of Large Obstacles and Mitigation Barriers on Heavy Gas Cloud Dispersion: a Liquefied Natural Gas Case-Study. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 51, p. 7643-7650, 2012.
- COLOMBINI, C.; BUSINI, V. Obstacle Influence on High Pressure Jets based on Computational Fluid Dynamics Simulations. **Chemical Engineering Transactions**, v. 77, p. 811-816, 2019.
- COLOMBINI, C. et al. Ground Influence on high-pressure methane jets: Practical tools for risk assessment. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 67, p. 1-11, 2020.
- COLOMBINI, C. et al. Unignited High-Pressure methane jet impinging a pipe rack: Practical tools for risk assessment. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, Milano, v. 69, p. 1 - 10, 2021.
- DERUDI, M. et al. Heavy gas dispersion in Presence of Large Obstacles: Selections of Modeling Tools. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 53, p. 9303-9310, 2014.
- FATAHIAN, E.; SALARIAN, H.; FATAHIAN, H. Numerical Investigation of Hazardous Gas Dispersion Over Obstacle and Residential Areas. **International Journal of Engineering**, v. 33, n. 10, p. 2087 - 2094, 2020.
- GANT, S. E. et al. **Hazardous Area Classification of Low Pressure Natural Gas Systems Using CFD Predictions**. Health and Safety Laboratory. Buxton. 2005.

HALL, J. E. et al. Flammability profiles associated with high pressure hydrogen jets released in close proximity to surfaces. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 30, p. 1-9, 2016.

HOURRI, A. et al. Numerical Investigation of the flammable extent of semi-confined Hydrogen and Methane Jets. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 36, p. 2567-2572, 2011.

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

IVINGS, M. J. et al. **Area classification for secondary releases from low pressure natural gas systems**. Health and Safety Laboratory. [S.l.]. 2008. (RR630).

MAHJOUR, S. N. et al. Influence de l'orientation de la vitesse du vent sur la dispersion d'un polluant autour d'un bâtiment. **Energ. Ren.**, v. 4, p. 107-123, 2001.

MAVROIDIS, I.; GRIFFITHS, R. F.; HALL, D. J. Field and wind tunnel investigations of plume dispersion. **Atmospheric Environment**, v. 37, p. 2903-2918, March 2003.

MEHDI, M.; PANIN, M. P. Use of computational fluid dynamics tools to calculate the dispersion of gas and aerosol emissions in conditions of a complex terrain. **Nuclear Energy and Technology**, v. 7, n. 1, p. 21-26, October 2020.

OLIVEIRA, T. C. L. D. **CONTRIBUIÇÕES PARA A CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS DEVIDO A LIBERAÇÃO BIFÁSICA VIA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL**. Universidade Federal de Campina Grande. Campina Grande. 2018.

OLIVEIRA, T. C. L. D.; NETO, A. T. P.; ALVES, J. J. N. CFD Simulation of Flashing Jet Applied to Area Classification. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 97, p. 465-479, February 2019.

PONTIGGIA, M. et al. Effect of Large Obstacles on High Momentum Jets Dispersion. **Chemical Engineering Transactions**, v. 36, p. 523-528, 2014.

PUGH, D.; BOSAUDER, P.; PARNELL, M. Hazardous Area Classifications using computational Fluid Dynamics Modelling. **Appita Technology, Innovation, Manufacturing, Environment**, v. 70, n. 2, p. 116-123, June 2017.

SOUZA, A. O. et al. A New Correlation for Hazardous Area Classification Based on Experiments and CFD Predictions. **Process Safety Progress**, Campina Grande, v. 38, n. 1, p. 21-26, March 2019.

TCHOUVELEV, A. V. et al. Effectiveness of small barriers as means to reduce clearance distances. **International Journal of Hydrogen Energy**, p. 1409-1415, 2007.

TOLIAS, I. C.; VENETSANOS, A. G. Comparison of convective schemes in hydrogen impinging jet CFD simulation. **International Conference on Hydrogen Safety**, p. 1 - 12, 2015.

WEBBER, 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**, v. 24, p. 612-621, April 2011.