PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM TECNOLOGIA DE
PROCESSOS QUÍMICOS E BIOQUÍMICOS
ESCOLA DE QUÍMICA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO

Dispersão de Gases Inflamáveis em Unidades de Processamento de Petróleo: Avaliação do Posicionamento de Detectores por Fluidodinâmica Computacional

Eduardo Guedes Gomes

Orientador:
Ricardo de Andrade Medronho, PhD

Julho, 2012

G663d Gomes, Eduardo Guedes.

Dispersão de Gases Inflamáveis em Unidades de Processamento de Petróleo: Avaliação do Posicionamento de Detectores por Fluidodinâmica Computacional./ Eduardo Guedes Gomes. Rio de Janeiro. - 2012.
XX, 164 p.: il.

Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos) – Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, Escola de Química - EQ, Rio de Janeiro, 2012.

Orientador: Ricardo de Andrade Medronho.

1. Dispersão de gases. 2. CFD. 3. Posicionamento de detectores. – Teses. I. Medronho, Ricardo de Andrade (Orient.). II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos. III. Dispersão de Gases Inflamáveis em Unidades de Processamento de Petróleo: Avaliação do Posicionamento de Detectores por Fluidodinâmica Computacional.

CDD 665.538

Dispersão de Gases Inflamáveis em Unidades de Processamento de Petróleo: Avaliação do Posicionamento de Detectores por Fluidodinâmica Computacional

Eduardo Guedes Gomes

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro como parte integrante dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Ciências (M Sc).

Aprovado por:

Prof. Paulo Fernando Ferreira Frutuoso e Melo, D.Sc.

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Prof. Caetano Moraes, Ph.D.

Orientado por:

Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D

Rio de Janeiro, RJ - Brasil
Julho de 2012

Dedico esta vitória a todos os meus amigos e familiares. Em especial aos meus pais, Paulo e Graça, e padrinhos, Carlos e Zilma, pelo legado da humildade, honestidade e retidão. Aos meus irmãos pelo incentivo, principalmente à irmã Naitê, pela preocupação extrema. À minha amada esposa Daniela pela paciência. À minha filha Maria Eduarda, o amor mais puro que já pude sentir, e que mesmo sem saber, é o meu maior combustível.

“Meu pai sempre dizia: Não levante a sua voz, melhore os seus argumentos".
Desmond Tutu

AGRADECIMENTOS

À minha família pelo amor, carinho e apoio irrestrito.

À PETROBRAS, em especial à Engenharia do Abastecimento (EAB), pela liberação dos horários dedicados ao mestrado.

Ao pessoal do LABCFD, em especial ao colega João Victor, pelo apoio e pelas inúmeras ajudas.

Ao meu orientador Ricardo de Andrade Medronho, por sempre estar disponível para a troca de ideias e de experiências e pela liberdade dada na condução deste trabalho.

Resumo da Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química/UFRJ como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

DISPERSÃO DE GASES INFLAMÁVEIS EM UNIDADES DE PROCESSAMENTO DE PETRÓLEO: AVALIAÇÃO DO POSICIONAMENTO DE DETECTORES POR FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Eduardo Guedes Gomes
Julho 2012

Orientador: Prof. Ricardo de Andrade Medronho, PhD

O sistema de detecção de incêndio e gás é parte integrante do projeto de segurança industrial para a proteção de unidades de processamento de petróleo (refinarias). A correta quantificação e localização dos detectores de fogo e gás nessas unidades é de suma importância para que os profissionais de operação da planta e da brigada de emergência recebam, o quanto antes, a informação de que um evento indesejável pode estar se desenvolvendo e, assim, que medidas mitigadoras possam ser tomadas de forma a minimizar os possíveis danos causados à vida humana, à propriedade, ao meio ambiente e à imagem da companhia. Para o caso de detectores de gases inflamáveis ou tóxicos as normas recomendam apenas que estes devem ser posicionados próximos aos possíveis pontos de vazamento, não indicando quantidade nem localização dos mesmos. Desta forma, o projeto fica dependente da experiência do projetista, podendo conduzir a sistemas super ou subdimensionados. Sendo assim, o presente trabalho objetivou a substituição desses critérios genéricos por uma análise quantitativa, baseada em critérios de engenharia, empregando-se o uso da fluidodinâmica computacional para a definição do comportamento das nuvens geradas quando da ocorrência de vazamento de gás em plantas de processo, com posterior definição dos melhores pontos para alocação dos detectores. Inicialmente, procurou-se validar qual modelagem melhor representa um escoamento sônico de gás na atmosfera. Para isso, foram feitas simulações de liberações sônicas e subsônicas, e comparando-se os resultados com dados experimentais obtidos na literatura, concluiu-se que a modelagem sônica é a mais apropriada. Definida a melhor modelagem, foram realizadas as simulações de dispersão gasosa em uma unidade de processo típica de uma refinaria de petróleo. Com as nuvens de gás geradas e com uma rotina computacional especialmente criada para a avaliação do posicionamento de detectores, pôde-se determinar que seis (06) detectores de gás localizados em pontos estratégicos foram capazes de detectar todos os trinta e dois (32) cenários de vazamento considerados no trabalho. Desta forma, mostrou-se que o uso da fluidodinâmica computacional, aliado a um programa computacional de avaliação do posicionamento de detectores, pode ser uma ferramenta extremamente útil nos projetos de segurança de plantas de processo que manipulam gases inflamáveis ou tóxicos.

Palavras-chave: Dispersão de gases. Detecção de gás. CFD. Posicionamento de detectores.

Abstract of the Master Dissertation presented to Programa em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos - EQ/UFRJ, as partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

GAS DISPERSION ANALISYS ON REFINERIES: PLACEMENT OF GAS DETECTORS USING COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS

Eduardo Guedes Gomes
July 2012

Supervisor: Ricardo de Andrade Medronho, PhD

The fire and gas detection system is part of industrial safety engineering design for refineries protection. The right quantification and location of fire and gas detectors in these units are very important for emergency brigade personnel receive, as soon as possible, the information that an undesirable event may be developing, so that mitigation measures can be taken to minimize possible damages to the human life, the property, the environment and company image. For flammable or toxic gas detectors the standards only recommend that these devices shall be positioned close to potential leak points, saying nothing about their quantity and location. Thus, the project is clearly dependent on the designer's experience and can lead to under or oversized systems. So this study aims to replace these generic criteria for a quantitative analysis based on engineering criteria, using the computational fluid dynamics (CFD) to define the behavior of clouds generated upon the occurrence of gas leaks in process plants, with further definition of the best location of detectors. Initially it was needed to validate the modeling that best represents a sonic flow of gas into the atmosphere. Sonic and subsonic simulations were conduced, comparing the results with experimental data from the literature, and concluding that the sonic modeling shown to be the most appropriate. Set the best modeling, gas dispersion simulations were carried out for a typical process unit of a petroleum refinery. With generated gas clouds and a computational routine specially created for the placement of detectors, it was determined that six (06) gas detectors located at strategic points were able to detect all thirty-two (32) leak scenarios considered in this study. In this way, it could be concluded that the use of computational fluid dynamics, combined with a computer program for placement of detectors, can be an extremely useful tool in safety engineering design for process plants handling flammable or toxic gases.

Key words: Gas dispersion. Gas detection. CFD. Placement of gas detectors.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO 1
1.1. OBJETIVOS DO TRABALHO 5
1.2. ETAPAS DO ESTUDO DE DISPERSÃO DE GÁS 6
1.3. O PROCESSO DE REFINO: HIDROTRATAMENTO 7
1.4. A UNIDADE DE HDT 9
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 11
2.1. MODELOS DE TERMO FONTE 11
2.1.1. ESCOAMENTOS GASOSOS EM ORIFÍCIOS 12
2.2. MODELOS DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA 16
2.3. DETERMINAÇÃO DO DIÂMETRO DO ORIFÍCIO DE VAZAMENTO 17
2.4. ESCOAMENTOS SÔNICOS X SUBSÔNICOS (COMPRESSÍVEIS X INCOMPRESSÍVEIS) 19
2.5. ALOCAÇÃO DE DETECTORES DE GÁS 21
2.5.1. KELSEY *ET AL.* (2002) 21
2.5.2. MIYATA E MORI (2011) 23
3. DETECÇÃO DE GASES 25
3.1. DETECÇÃO DE VAZAMENTO 25
3.2. LIMITES DE INFLAMABILIDADE E NÍVEIS DE AÇÃO 26
4. FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD) 29
4.1. INTRODUÇÃO 29
4.2. ETAPAS DE UMA SIMULAÇÃO DE CFD 30
4.2.1. PARÂMETROS DE UMA SIMULAÇÃO DE DISPERSÃO DE GASES 32
4.3. MODELOS MATEMÁTICOS 33
4.3.1. CONSERVAÇÃO DA MASSA (EQUAÇÃO DA CONTINUIDADE) 33
4.3.2. CONSERVAÇÃO DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO (EQUAÇÃO DO MOVIMENTO) 34
4.3.3. TURBULÊNCIA 35

4.3.3.1. MODELOS DE VISCOSIDADE TURBULENTA 38
4.3.3.1.1. MODELOS A 2 EQUAÇÕES 39
4.3.3.2. MODELOS DOS TENSORES DE REYNOLDS 41
4.3.4. TRANSFERÊNCIA DE CALOR 42
4.4. MALHA 43
4.4.1. QUALIDADE DA MALHA 45
5. MATERIAIS E MÉTODOS 47
5.1. PROGRAMAS E PODER COMPUTACIONAL 47
5.2. TESTES MODELO 47
5.2.1. GEOMETRIA E MALHA 48
5.2.2. ENTRADA DE GÁS: FURO, *SOURCE POINT* E TRONCO DE CONE 52
5.2.3. CARACTERÍSTICAS DO VAZAMENTO E CONDIÇÕES DE CONTORNO 53
5.3. VALIDAÇÃO DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA 56
5.3.1. GEOMETRIA E MALHA 58
5.3.2. CARACTERÍSTICAS DO VAZAMENTO E CONDIÇÕES DE CONTORNO 59
5.4. ESTUDO DE DISPERSÃO DE GÁS EM UNIDADE DE HDT 63
5.4.1. GEOMETRIA E MALHA 64
5.4.2. TESTE DE INDEPENDÊNCIA DE MALHA 66
5.4.3. CARACTERÍSTICAS DO VAZAMENTO E CONDIÇÕES DE CONTORNO 69
5.4.4. DEFINIÇÃO DAS CONDIÇÕES METEOROLÓGICAS DA REGIÃO DA UNIDADE 72
5.5. POSICIONAMENTO DOS DETECTORES DE GÁS 74
5.5.1. METODOLOGIA PROPOSTA 75
6. RESULTADOS E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS 78
6.1. TESTES MODELO 78
6.2. VALIDAÇÃO DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA 86
6.3. ESTUDO DE DISPERSÃO NA UNIDADE DE HDT 89
6.3.1. TESTE DE INDEPENDÊNCIA DE MALHA 89

6.3.2. VAZAMENTO NOS COMPRESSORES DA UNIDADE DE HDT 89

6.3.2.1. VENTO NORTE 92

6.4. POSICIONAMENTO DOS DETECTORES DE GÁS 101

7. CONCLUSÕES 109

8. RECOMENDAÇÕES E SUGESTÕES 111

9. BIBLIOGRAFIA 112

ANEXO 115

VENTO SUL 116

VENTO LESTE 123

VENTO OESTE 130

VENTO NORDESTE 137

VENTO NOROESTE 144

VENTO SUDESTE 151

VENTO SUDOESTE 158

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Principais parâmetros a serem considerados numa simulação de dispersão de gases por CFD. 32

Tabela 2: Faixas de qualidade de malha para os parâmetros *skewness* (ANSYS 13.0 Help, 2011). 46

Tabela 3: Faixas de qualidade de malha para os parâmetros *orthogonal quality* (ANSYS 13.0 Help, 2011). 46

Tabela 4: Testes Modelo – Casos simulados. 48

Tabela 5: Testes Modelo – Dimensões do cilindro. 49

Tabela 6: Testes Modelo – Condições de contorno e parâmetros da simulação. 56

Tabela 7: Validação da simulação numérica – Condições de contorno e parâmetros da simulação. 61

Tabela 8: Parâmetros das malhas. 67

Tabela 9: Especificação das simulações realizadas. 71

Tabela 10: Unidade de HDT - Condições de contorno e parâmetros da simulação 72

Tabela 11: Direção dos ventos e suas respectivas velocidades médias (Fonte: Estação Sambaetiba). 73

Tabela 12: Teste de independência de malhas: Concentração de H_2. 89

Tabela 13: Cenário de vazamento x Detector atuado por este cenário. 102

Tabela 14: Coordenada dos detectores e cenários detectados. 104

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Etapas do estudo de dispersão (Fleck, 2008). 6

Figura 2: Fluxograma Básico de uma unidade de HDT (Do Brasil et al., 2011). 9

Figura 3: Escoamento crítico de gás através de orifício (adaptado de Crowl *et al*., 2002). 14

Figura 4: Distribuição dos diâmetros de vazamento (LNE, 2009). 18

Figura 5: Esquema de desenvolvimento do jato sob condições sônicas de escoamento (adaptado de HSL, 2005). 20

Figura 6: Etapas de uma simulação de CFD utilizando o programa CFX da ANSYS. 31

Figura 7: Velocidade instantânea *u*, velocidade média *U* e flutuação *u'* (Bird *et al*., 2004). ... 36

Figura 8: Malha estruturada com elementos hexaédricos (Alves, 2012). 44

Figura 9: Malha não-estruturada com elementos tetraédricos (Alves, 2012). 44

Figura 10: Malha Híbrida contendo elementos hexaédricos próximos à parede e tetraédricos na região central (Alves, 2012). 45

Figura 11: Vetores das relações para determinação do *ortogonal quality*: (a) célula, (b) face (ANSYS 13.0 Help, 2011). 46

Figura 12: Geometria idealizada para realização dos Testes Modelo. 49

Figura 13: Malha tetraédrica – Corte XY. 50

Figura 14: Detalhe do refinamento no ponto de vazamento. 51

Figura 15: Refinamento da malha: (a) ao longo do eixo Z, (b) escoamento de gás dentro da área refinada. 51

Figura 16: Ponto de liberação e localização dos detectores (Roberts *et al*., 2006). 57

Figura 17: Distâncias dos detectores do ponto de vazamento (Roberts *et al*., 2006) 57

Figura 18: Malha hexaédrica desenvolvida para validação da simulação numérica. 58

Figura 19: Refinamento interno da malha – Corte ZX. 59

Figura 20: Refinamento no orifício de vazamento do gás inflamável. 59

Figura 21: Regiões 2D da simulação: 21.a: *inlet* do vento; 21.b: regiões de *opening* (entrada ou saída dos gases). 62

Figura 22: Compressores de H_2 selecionados para representar o vazamento de gás na unidade. 64

Figura 23: Geometria da unidade de HDT. 65

Figura 24: Malha gerada no ANSYS Meshing, a partir da geometria da unidade. 66

Figura 25: Teste de independência de malha: pontos de medição da concentração de H_2. 67

Figura 26: Distribuição dos elementos da malha pelo parâmetro *skewness*. 68

Figura 27: Representação dos elementos classificados como tendo um *skewness* de baixa qualidade. 69

Figura 28: Distribuição dos elementos da malha pelo parâmetro *orthogonal quality*. 69

Figura 29: Rosa dos Ventos da unidade. 73

Figura 30: Decomposição do vetor velocidade do vento noroeste. 74

Figura 31: Vista superior dos possíveis pontos de detecção num espaçamento 5 x 5 m. 77

Figura 32: Vista sul dos possíveis pontos de detecção num espaçamento de 5 x 5 m. 77

Figura 33: Velocidade de escoamento de H_2 na linha central ($0 \leq Z \leq 8$ m). 79

Figura 34: Velocidade de escoamento de H_2 na linha central (detalhe da região próxima ao ponto de liberação). 79

Figura 35: Número de Mach na linha central ($0 \leq Z \leq 8$ m). 80

Figura 36: Comportamento do número de Mach (Ma ou M) durante o processo de expansão do gás à alta pressão – Escoamento sônico (adaptado de Lees, 1996). 81

Figura 37: Número de Mach ao longo da linha central: (a) distância para atingir Ma = 0,3; (b) detalhe da região supersônica. 81

Figura 38: Densidade da mistura Ar/H_2 na linha central ($0 \leq Z \leq 8$m). 82

Figura 39: Fração volumétrica de H_2 na linha central ($0 \leq Z \leq 8$m). 83

Figura 40: Fração volumétrica de H_2 ($-0,5 \leq Y \leq 0,5$m) em Z = 0,5 m. 84

Figura 41: Fração volumétrica de H_2 ($-0,5 \leq Y \leq 0,5$m) em Z = 1,5 m. 84

Figura 42: Fração volumétrica de H_2 (-0,5 ≤ Y ≤ 0,5m) em Z = 3,0 m. 85

Figura 43: Fração volumétrica de H_2 (-0,5 ≤ Y ≤ 0,5m) em Z = 5,0 m. 85

Figura 44: Concentração de H_2: dados experimentais *versus* Simulação numérica. 87

Figura 45: Dispersão de H_2 do compressor C-02A, direção de vazamento para baixo, vento norte. Isosuperfície com fração volumétrica de 0,008: (a) escoamento sônico; (b) escoamento subsônico. 92

Figura 46: Campo de escoamento do vento na direção norte nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano YZ).....93

Figura 47: Cenário 1: Vento norte, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 94

Figura 48: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento norte (cenário 1). 95

Figura 49: Cenário 2: Vento norte, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 96

Figura 50: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento norte (cenário 2). 97

Figura 51: Cenário 3: Vento norte, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 98

Figura 52: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento norte (cenário 3). 98

Figura 53: Cenário 4: Vento norte, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 99

Figura 54: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento norte (cenário 4). 100

Figura 55: Localização dos detectores na unidade: (a) Vista superior; (b) Vista em corte (Sul). 103

Figura 56: Cenário 10 (vento leste – C-02A – direção leste) coberto pelo detector 6.....105

Figura 57: Cenário 18 (vento nordeste – C-02A – direção leste) coberto pelo detector 6....105

Figura 58: Cenário 21 (vento noroeste – C-02A – direção baixo) coberto pelo detector 6...106

Figura 59: Cenário 23 (vento noroeste – C-02B – direção baixo) coberto pelo detector 6. ..106

Figura 60: Cenário 13 (vento oeste – C-02A – direção baixo) coberto pelo detector 6. 107

Figura 61: Posição dos detectores para o caso da Malha de Busca Inicial ter espaçamento de 3 x 3 m. 108

Figura 62: Campo de escoamento do vento na direção sul nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano ZY).....116

Figura 63: Cenário 5: Vento sul, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 117

Figura 64: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento sul (cenário 5).....118

Figura 65: Cenário 6: Vento sul, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 119

Figura 66: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento sul (cenário 6). 119

Figura 67: Cenário 7: Vento sul, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 120

Figura 68: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento sul (cenário 7).....121

Figura 69: Cenário 8: Vento sul, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 122

Figura 70: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento sul (cenário 8). 122

Figura 71: Campo de escoamento do vento na direção leste nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano ZX). 123

Figura 72: Cenário 9: : Vento leste, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 124

Figura 73: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento leste (cenário 9). 125

Figura 74: Cenário 10: Vento leste, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 126

Figura 75: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento leste (cenário 10). 126

Figura 76: Cenário 11: Vento leste, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 127

Figura 77: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento leste (cenário 11). 128

Figura 78: Cenário 12: Vento leste, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 129

Figura 79: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento leste (cenário 12). 129

Figura 80: Campo de escoamento do vento na direção oeste nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano ZX). 130

Figura 81: Cenário 13: Vento oeste, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 131

Figura 82: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento oeste (cenário 13). 132

Figura 83: Cenário 14: Vento oeste, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 133

Figura 84: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento oeste (cenário 14). 133

Figura 85: Cenário 15: Vento oeste, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 134

Figura 86: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento oeste (cenário 15). 135

Figura 87: Cenário 16: Vento oeste, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 136

Figura 88: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento oeste (cenário 16). 136

Figura 89: Campo de escoamento do vento na direção nordeste nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano diagonal).....137

Figura 90: Cenário 17: Vento nordeste, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 138

Figura 91: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento nordeste (cenário 17).....139

Figura 92: Cenário 18: Vento nordeste, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 140

Figura 93: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento nordeste (cenário 18). 140

Figura 94: Cenário 19: Vento nordeste, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 141

Figura 95: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento nordeste (cenário 19).....142

Figura 96: Cenário 20: Vento nordeste, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 143

Figura 97: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento nordeste (cenário 20). 143

Figura 98: Campo de escoamento do vento na direção noroeste nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano diagonal).....144

Figura 99: Cenário 21: Vento noroeste, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 145

Figura 100: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento noroeste (cenário 21).....146

Figura 101: Cenário 22: Vento noroeste, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.....147

Figura 102: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento noroeste (cenário 22). 147

Figura 103: Cenário 23: Vento noroeste, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.....148

Figura 104: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento noroeste (cenário 23).....149

Figura 105: Cenário 24: Vento noroeste, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 150

Figura 106: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento noroeste (cenário 24). 150

Figura 107: Campo de escoamento do vento na direção sudeste nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano diagonal).....151

Figura 108: Cenário 25: Vento sudeste, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 152

Figura 109: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento sudeste (cenário 25). 153

Figura 110: Cenário 26: Vento sudeste, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 154

Figura 111: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento sudeste (cenário 26). 154

Figura 112: Cenário 27: Vento sudeste, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 155

Figura 113: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento sudeste (cenário 27).....156

Figura 114: Cenário 28: Vento sudeste, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 157

Figura 115: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento sudeste (cenário 28). 157

Figura 116: Campo de escoamento do vento na direção sudoeste nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano diagonal).....158

Figura 117: Cenário 29: Vento sudoeste, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.....159

Figura 118: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento sudoeste (cenário 29). 160

Figura 119: Cenário 30: Vento sudeste, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 161

Figura 120: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento sudoeste (cenário 30). 161

Figura 121: Cenário 31: Vento sudoeste, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.....162

Figura 122: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento sudoeste (cenário 31).....163

Figura 123: Cenário 32: Vento sudoeste, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte. 164

Figura 124: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento sudoeste (cenário 32). 164

1. INTRODUÇÃO

O petróleo no estado em que é extraído tem pouquíssimas aplicações, sendo uma complexa mistura de moléculas compostas principalmente de carbono e hidrogênio, além de algumas impurezas. Para que todo o potencial energético do petróleo seja aproveitado, bem como seu uso como fonte de matérias-primas, este deve ser submetido a processos de separação, conversão e tratamentos nas unidades de processamento – refinarias, numa série de operações, transformando-o nos seus diversos derivados.

Desta forma, o petróleo é processado de forma conveniente com o propósito de se obter a maior quantidade, na melhor qualidade possível, de produtos valiosos. Atingir este objetivo com o menor custo operacional é a diretriz básica da refinação.

No entanto, há de se ter em mente que, em quaisquer das etapas, quer seja na exploração e produção, no transporte ou no seu refino, o petróleo, seus derivados e alguns de seus contaminantes oferecem elevados riscos, uma vez que são compostos inflamáveis, além de alguns deles também serem tóxicos. Desta forma, faz-se necessário que medidas de segurança sejam adotadas com o intuito de evitar ou minimizar a freqüência ou a severidade de acidentes envolvendo estes produtos, o que é comumente chamado de segurança de processo.

Neste particular, todas as disciplinas envolvidas num projeto de uma unidade de processamento *onshore* (refinarias) possuem grande importância. A disciplina de arquitetura em conjunto com a disciplina de processo, por exemplo, é responsável pelo desenvolvimento de um arranjo (*layout*) o mais seguro possível para a unidade. Por sua vez, a disciplina de automação e instrumentação é responsável por toda a parte de controle dos parâmetros de processo (vazão, pressão, temperatura, nível, etc), bem como dos intertravamentos que conduzirão a unidade a uma parada, total ou parcial, de maneira segura. Já o projeto de drenagem tem fundamental importância em fazer com que vazamentos de líquidos inflamáveis ou combustíveis possam ser conduzidos para locais seguros, bacias de contenção, por exemplo, afastando-os de estruturas e equipamentos.

Contudo, quando todas essas barreiras são transpostas e o incidente, como vazamento de gás, ou o acidente, incêndio ou explosão, ocorrem, são os sistemas de segurança industrial que se apresentam como ferramentas a serem utilizadas na tentativa de se evitar,

ou ao menos mitigar, danos à vida humana, ao meio ambiente, aos equipamentos e também à imagem da companhia.

Os projetos de segurança industrial de unidades de processamento de petróleo em refinarias podem ser divididos, de maneira geral, em três grandes sistemas:

- ✓ Sistemas de Combate a Incêndio

Os objetivos do sistema de combate a incêndio são: resfriamento de estruturas e equipamentos; controle do incêndio, isto é, impedir que o mesmo se espalhe; ou, propriamente, a sua extinção. Vários métodos de controle e supressão, portáteis ou fixos, estão disponíveis para a proteção de uma instalação, tais como: sistemas de proteção por água (jato pleno, neblina, água pulverizada, etc.), por espuma, sistemas gasosos (CO_2, agentes limpos), entre outros.

Antes da escolha por um desses métodos ou pela combinação deles, o tipo de incêndio deve ser identificado e analisado. Para isso, a maneira mais fácil é pelo conhecimento dos materiais, suas características, e das suas condições de operação no processo.

- ✓ Sistemas de Proteção Passiva

Como já mencionado, os espaçamentos seguros entre equipamentos e a bacia de contenção de líquidos inflamáveis são de fundamental importância para minimizar o envolvimento de um equipamento ou conjunto de equipamentos em um incêndio. No entanto, outros meios de proteção passiva são ainda necessários, e dentre estes podemos destacar: a classificação de áreas, o *fireproofing* (proteção contra incêndio) e a resistência à explosão.

Classificação de Áreas – É sabido que equipamentos elétricos são passíveis de ser a fonte de ignição para vapores e gases inflamáveis e poeiras e fibras combustíveis. Desta forma, a classificação de áreas tem por objetivo definir as regiões com potencial formação de misturas inflamáveis (atmosferas explosivas), auxiliando, portanto, na seleção e aplicação dos equipamentos, dispositivos e materiais elétricos para uso nesses ambientes. Estes, então, quando localizados em áreas com possibilidade de existência de uma atmosfera explosiva, deverão ter proteção especial, como por exemplo: à prova de explosão, pressão positiva, imersão em óleo ou areia, segurança intrínseca, entre outras, fazendo com que

estes equipamentos, materiais e dispositivos elétricos deixem de ser uma possível fonte de ignição para a mistura inflamável.

Fireproofing – Basicamente, é a capacidade que um equipamento ou o seu suporte tem de manter a sua integridade estrutural durante o incêndio.

O principal ganho do *fireproofing* ocorre durante os estágios iniciais de um incêndio, quando todos os esforços estão direcionados para o isolamento do combustível que alimenta o incêndio, para o acionamento dos sistemas de supressão, e, se necessário, até mesmo para a parada (*shutdown*) da unidade. Durante este período crítico, se equipamentos e estruturas que não são protegidos por *fireproofing* perderem a sua resistência devido à exposição ao calor (radiação térmica) e vierem a colapsar, possivelmente teremos o escalonamento do acidente, devido a rupturas de linhas e de vasos, e vazamento de produtos inflamáveis.

Resistência à Explosão (*blast resistant*) – Tem por objetivo prover ambientes com resistência às ondas de sobrepressão originadas por possíveis explosões na planta. Um dos princípios fundamentais deste sistema é de que a pessoa que se encontra dentro da edificação no momento da explosão tenha, no mínimo, o mesmo grau de proteção de outra que esteja no ambiente externo, ou seja, ela não deve ser afetada pelo desabamento da estrutura.

É usual que somente as edificações que necessitem permanecer habitadas pelos profissionais responsáveis pelas ações de emergência recebam este tipo de proteção passiva, desde que estas edificações estejam situadas dentro do raio de ação da onda de sobrepressão que causaria seu desabamento. Em refinarias, normalmente a edificação onde está localizado o Centro Integrado de Controle - CIC, é que pode necessitar deste tipo de proteção.

Uma medida mais salutar e econômica é alocar esses prédios distantes dos maiores cenários de risco, não necessitando, assim, de qualquer tipo de proteção estrutural extra.

- ✓ Sistemas de Detecção de Fogo e Gás (F&G)

Os sistemas de detecção de F&G são compostos por detectores de incêndio, detectores de gases inflamáveis e/ou tóxicos, alarmes visuais e sonoros, e botoeiras de emergência (acionadores manuais).

Os controles de processo e instrumentação fornecem informações somente das condições no interior do processo, ou seja, dentro dos equipamentos, das tubulações, etc. Eles não reportam ou controlam nenhuma condição fora deste limite. O sistema de detecção de F&G preenche esta “lacuna”, visto que são alocados no ambiente externo ao processo e alertam sobre condições que são consideradas perigosas, quando observadas neste ambiente.

Espera-se que estes sistemas detectem e informem o mais rapidamente possível a ocorrência de um incêndio ou vazamento de gás, reduzindo-se, com isso, o tempo de resposta para a evacuação das pessoas e o controle desta emergência.

Pode-se perceber, portanto, a importância dos sistemas de detecção de F&G nas instalações industriais.

O dimensionamento, ou seja, a quantificação e a localização, das botoeiras de emergência, dos detectores de incêndio (chama, calor ou fumaça), e dos alarmes visuais e sonoros são regidos por normas técnicas nacionais e internacionais, sendo teoricamente simples o projeto desses sistemas. Porém, quando tratamos de detecção de gás, são muitos os parâmetros envolvidos, intrínsecos e extrínsecos ao processo, para que o seu dimensionamento seja realizado:

- Arranjo da instalação;
- Tipo de gás vazado (densidade do gás);
- Condições de operação (temperatura, pressão, etc.);
- Direção do vazamento;
- Diâmetro do furo;
- Velocidades de vento e demais condições meteorológicas;
- Entre outros.

Por este motivo, as normas que tratam deste assunto se restringem a informar que todos os parâmetros acima descritos devem ser levados em consideração quando do dimensionamento dos detectores de gás, deixando a cargo do projetista a sua quantificação e localização.

Confirmando o descrito acima, segundo Miyata e Mori (2011), os detectores de gás devem sem instalados próximos a tanques de armazenamento, em torno das unidades de

processo, e nos limites de bateria da planta. No entanto, não é definida a maneira como essa instalação deve ser feita.

Sendo assim, como forma de eliminar este empirismo, e com o avanço da capacidade de processamento dos computadores e os avanços nos algoritmos e técnicas numéricas, as ferramentas de fluidodinâmica computacional (*computational fluid dynamics* - CFD) estão sendo cada vez mais empregadas na resolução de problemas envolvendo o complexo escoamento desses fluidos em unidades de processo.

1.1. Objetivos do Trabalho

O trabalho se propõe a modelar e analisar o comportamento das nuvens de gás geradas pelo vazamento de hidrogênio (H_2) numa unidade de hidrotratamento[1] (HDT) de uma refinaria típica da PETROBRAS, pela simulação computacional através de CFD.

Posteriormente, e de posse das nuvens geradas, será feita a avaliação do posicionamento dos detectores de gás, de forma a garantir que, com um número mínimo de detectores, e desde que corretamente alocados, todas as nuvens possam ser detectadas.

O processo de avaliação do posicionamento dos detectores é muito importante tanto em termos de custos, como também de confiabilidade do sistema de detecção de gás.

Um elevado número de detectores numa planta de processo, além do maior custo inicial para sua aquisição, também leva a um dispêndio considerável para a sua calibração rotineira, além do tempo (homem-hora) gasto para a execução dessa tarefa. Se não for submetida à calibração correta e permanente, a confiabilidade do sistema estará inteiramente comprometida, sendo melhor até mesmo que não haja qualquer sistema de detecção de gás.

Por outro lado, com um número sub-dimensionado de detectores, possivelmente alguns vazamentos não serão detectados, causando: ou uma falsa sensação de segurança na planta, pois este gás vazado poderia não encontrar uma fonte de ignição; ou um grave acidente, visto que, com a não detecção, uma maior nuvem inflamável poderia se formar antes da sua ignição.

---

[1] Ver seções 1.3 e 1.4.

Os estudos de dispersão de gases devem ser elaborados, preferencialmente, durante as fases de projeto da unidade, antes da sua entrada em operação, e, além disso, devido às suas particularidades, cada unidade de processo deverá possuir o seu próprio estudo.

1.2. Etapas do Estudo de Dispersão de Gás

O estudo de dispersão de gases consiste na análise do escoamento do gás liberado para a atmosfera através do orifício de vazamento, considerando sua interação com ar/vento, obstáculos e a geometria da unidade.

A Figura 1 apresenta as etapas necessárias para a realização do estudo de dispersão de gases, com posterior avaliação do posicionamento dos detectores.

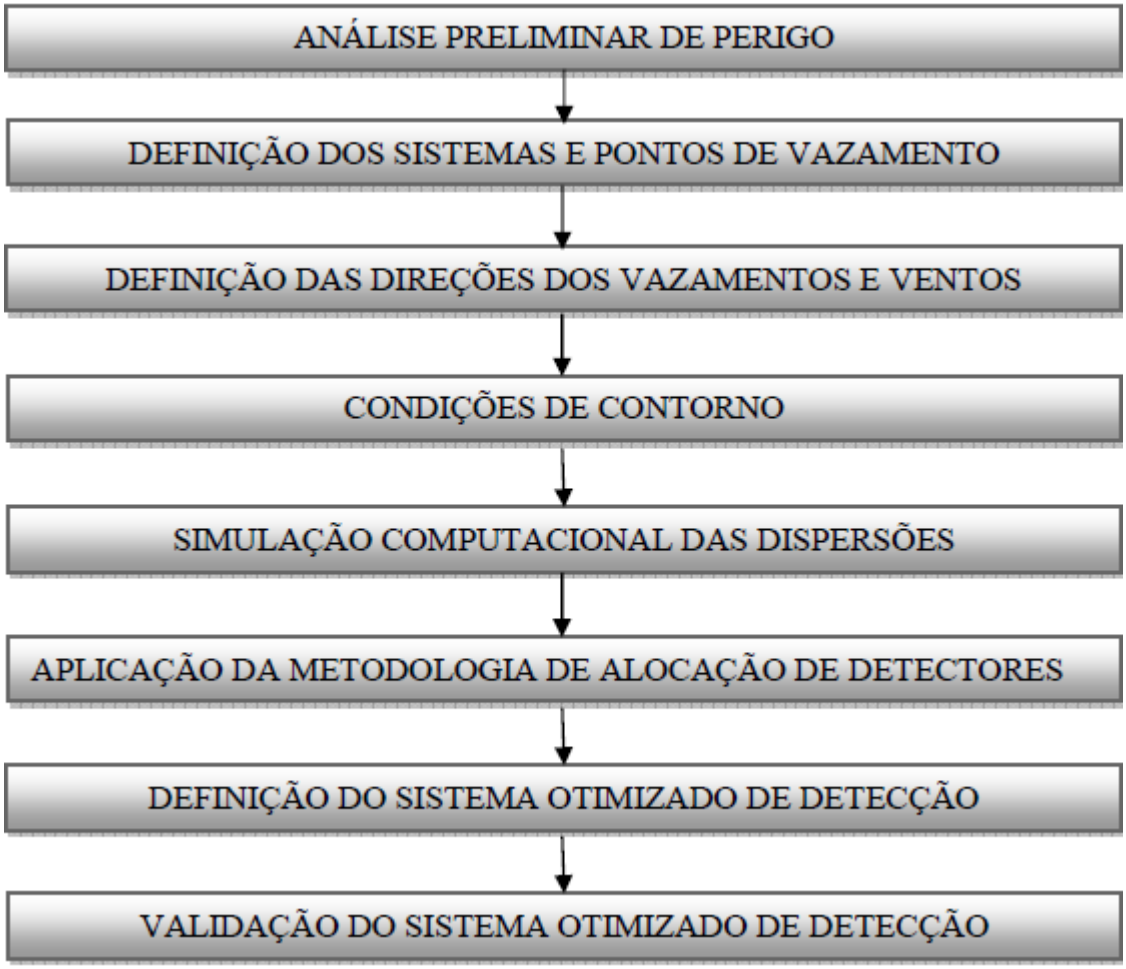


Figura 1: Etapas do estudo de dispersão (Fleck, 2008).

A Análise Preliminar de Perigos - APP, técnica qualitativa de análise de riscos, visa definir os possíveis pontos de vazamento/liberação de material inflamável ou tóxico na planta. Uma vez tendo sido obtidos esses pontos, definem-se as direções de liberação dos mesmos.

As condições meteorológicas do local onde está localizada a planta, bem como as características do gás vazado, como pressão, temperatura e composição, devem, obrigatoriamente, ser levadas em consideração no estudo (Fleck, 2008).

Posteriormente, e com as informações obtidas nas etapas anteriores, efetua-se a análise do vazamento propriamente dito, que é a determinação da quantidade de gás vazado, através do uso de modelos de termo fonte, sendo esta quantidade função da geometria e do diâmetro do orifício de vazamento e das condições termodinâmicas no local do vazamento.

Todas as informações obtidas são, então, entradas (*inputs*) para o *software* de fluidodinâmica computacional, que fornecerá as soluções numéricas das equações de conservação que governam este escoamento. Para o caso específico de vazamento de gás numa planta de processo, os dados mais importantes são as concentrações desse gás na atmosfera, para que possa ser conhecida a extensão do risco que está se tratando.

No domínio de interesse é gerada uma malha (rede) de possíveis pontos de detecção. Os perfis de concentração dos gases, em forma de nuvens, são então "lançados" nestes pontos para a realização da avaliação do posicionamento dos detectores. Os pontos que conseguem captar, na concentração de interesse, o maior número de nuvens são, então, selecionados, e os pontos que captam somente nuvens redundantes, ou seja, nuvens que já foram detectadas por outros pontos, são eliminados.

Desta forma, de posse do número mínimo de pontos que conseguem captar todas as nuvens, chega-se à configuração ótima do sistema de detecção de gás.

1.3. O Processo de Refino: Hidrotratamento

O processo de hidrorrefino (HDR) consiste no tratamento de frações de petróleo com hidrogênio, na presença de um catalisador, sob condições operacionais definidas em função do objetivo dessa etapa do refino.

As unidades de HDR podem ser divididas em unidades de hidroconversão (HC), cujo objetivo é produzir frações mais leves e de melhor qualidade do que a carga; e em unidades de hidrotratamento (HDT), que possuem o objetivo de melhorar as

propriedades de um produto sem alterar fortemente a sua faixa de destilação original (Do Brasil *et al*., 2011).

Desta forma, o HDT é um processo de refino cuja finalidade é estabilizar um determinado corte de petróleo ou eliminar compostos indesejáveis dos mesmos. Esta estabilização é conseguida por meio da hidrogenação de compostos reativos presentes, como por exemplo, as mono-olefinas[2] e as diolefinas. Os elementos indesejáveis removidos pela hidrogenação incluem: enxofre, nitrogênio, oxigênio, halogênios e metais.

O hidrotratamento pode ser empregado em todos os cortes de petróleo, tais como nafta, querosene, diesel, gasóleos para craqueamento, dentre outros.

Atualmente, o processamento com hidrogênio é intensamente aplicado em refinarias modernas, devido, principalmente, a dois fatores:

- Necessidade de redução cada vez maior dos teores de enxofre nos derivados, uma vez que os gases de queima deste elemento (SO_2 e SO_3) são altamente poluentes;
- Novas tecnologias permitem a produção de hidrogênio a preços razoavelmente baixos, tornando os processos de hidrogenação econômicos. O hidrogênio pode ser obtido de uma corrente gasosa de unidades de reforma catalítica ou por intermédio de unidades de geração próprias.

As principais reações do processo são as de hidrodessulfurização ($S + H_2 \rightarrow H_2S$), porém, outras reações podem ocorrer em grau proporcional à severidade da operação. As reações mais típicas são:

- Mercaptans: $R\text{-}SH + H_2 \rightarrow R\text{-}H + H_2S$
- Sulfetos: $R\text{-}S\text{-}R' + 2H_2 \rightarrow R\text{-}H + R'\text{-}H + H_2S$
- Dissulfetos: $R\text{-}S\text{-}S\text{-}R' + 3H_2 \rightarrow R\text{-}H + R'\text{-}H + 2H_2S$

Nas condições típicas empregadas industrialmente, as reações de hidrodessulfurização são irreversíveis e exotérmicas. Compostos como mercaptanos, sulfetos e dissulfetos, comumente presentes nas frações de nafta e querosene, reagem com o hidrogênio segundo as reações exemplificadas acima, em temperaturas relativamente baixas e pressões entre 20 a 30 atmosferas (Do Brasil *et al*., 2011).

---

[2] Olefinas – hidrocarboneto alifático, de cadeia aberta, apresentando ao menos uma ligação dupla entre os átomos de carbono.

A remoção de nitrogênio é feita em condições bem mais severas que a remoção do enxofre. A eficiência da hidrodessulfurização depende, sobretudo, do tipo de molécula que está contida no enxofre. Compostos de cadeia aberta e de baixos pontos de ebulição são facilmente dessulfurizados, ao passo que compostos cíclicos e altos pesos moleculares necessitam de condições mais severas.

1.4. A Unidade de HDT

A unidade de HDT convencional, conforme Figura 2, pode ser subdividida em duas seções: a seção de reação, a alta pressão, e a seção de separação de gases e fracionamento, a baixa pressão. Unidades complexas podem ter mais de uma seção de reação e de separação (Do Brasil *et al*., 2011).

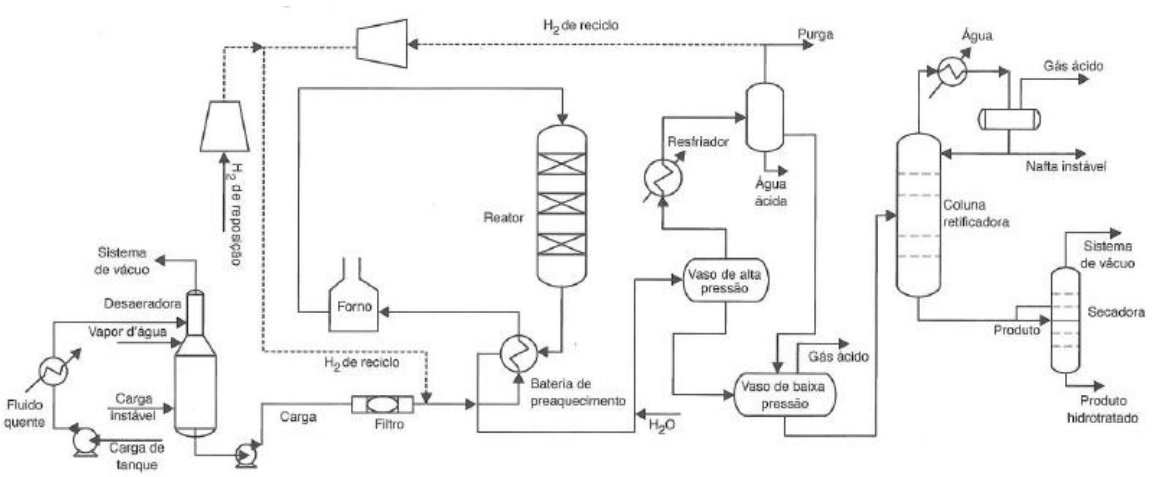


Figura 2: Fluxograma Básico de uma unidade de HDT (Do Brasil *et al*., 2011).

A seguir, uma explanação sucinta do processo de hidrotratamento de óleo em uma das diversas refinarias da PETROBRAS. Para os demais derivados (nafta, querosene, entre outros), os processos são semelhantes, diferindo apenas em pequenos detalhes e condições operacionais.

Como já comentado, o óleo necessita de um pequeno tratamento para adequá-lo ao consumo. A presença de compostos de nitrogênio e enxofre, por exemplo, pode causar uma rápida deterioração do produto, com consequente alteração de suas propriedades. Além disso, compostos de enxofre tornam o óleo corrosivo. Torna-se necessário, portanto, a remoção desses compostos.

O óleo, proveniente da unidade de destilação atmosférica, passa por filtros para que eventuais partículas possam ser removidas. Posteriormente, ele é misturado ao gás (H_2) de reciclo e ao gás (H_2) de reposição (*make-up*) e é pré-aquecido em permutadores, trocando calor com a carga do efluente do reator. Um forno cede ao óleo o restante da energia necessária às reações, sob a forma de aumento de temperatura.

No reator ocorrem as reações de dessulfurização e denitrificação no leito fixo de um catalisador. O efluente do reator, após ser resfriado, sofre um *flash* a alta pressão, onde o excesso de hidrogênio é eliminado. O produto líquido é retirado e submetido a um segundo *flash*, desta vez a baixa pressão, onde o gás combustível e impurezas (H_2S e NH_3) são vaporizados. Numa etapa posterior o óleo é retificado com vapor d'água, eliminando-se aí os últimos traços de compostos voláteis. Como última etapa, o óleo sofre uma secagem a vácuo, de modo que traços de água não sejam arrastados pelo óleo.

O hidrogênio recuperado no primeiro *flash* recebe uma injeção de hidrogênio de reposição, é recomprimido, aquecido e retorna ao processo. O gás combustível produzido na unidade contém uma quantidade substancial de H_2S, podendo ser aproveitado para a produção de enxofre elementar, ou, não havendo esta possibilidade, é queimado em fornos e caldeiras da própria refinaria.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. Modelos de Termo Fonte

A maioria dos acidentes nas plantas químicas resulta no derramamento ou liberação de materiais tóxicos, inflamáveis e explosivos (Crowl *et al.*, 2002). Material pode ser liberado, por exemplo, através de orifícios e trincas em tanques e tubulações, vazamentos em flanges, em selos de bombas e compressores, em válvulas e em uma grande variedade de outras fontes.

Os modelos de termo fonte representam o processo de liberação desse material e fornecem informações úteis para se determinar as conseqüências de um acidente, incluindo a taxa de liberação do material, a quantidade total liberada e o seu estado físico. De posse dessas informações, um modelo de dispersão de gases pode ser empregado de forma a descrever como esse material é transportado e dispersado (níveis de concentração) no ambiente.

Os modelos fonte são construídos a partir de equações fundamentais e empíricas que representam os processos físico-químicos que ocorrem durante a liberação dos materiais. Para uma planta razoavelmente complexa, vários modelos de termo fonte são necessários para descrever estas liberações. Frequentemente os resultados são apenas estimados, visto que as propriedades dos materiais não estão adequadamente estabelecidas ou porque os processos físicos não são bem compreendidos (Crowl *et al.*, 2002).

Os mecanismos de liberação podem ser classificados em liberações de grandes proporções e liberações em orifícios. Na liberação de grandes proporções, desenvolve-se uma abertura de grandes dimensões em um equipamento na unidade do processo, liberando uma quantidade substancial de material em um período de tempo muito curto. Na liberação por orifício, o material sai a uma taxa suficientemente baixa para que as condições a montante, isto é, no interior do equipamento, não sejam imediatamente afetadas, de modo que a hipótese de pressão constante a montante é de emprego comum.

Estamos particularmente interessados neste segundo mecanismo de liberação, visto que grandes liberações podem ser facilmente detectadas pelos dispositivos de processo (pressostatos, medidores de vazão, etc) ou, em alguns casos, pelo circuito fechado de TV (CFTV) existente em cada unidade.

Existem diversos modelos de termo fonte que representam as liberações por orifício, de acordo com o estado físico do material e suas condições de armazenamento ou manuseio. No presente trabalho, nos dedicaremos, portanto, aos vazamentos de gás/vapor nesses orifícios.

2.1.1. Escoamentos Gasosos em Orifícios

Para escoamentos de líquidos, a variação da energia cinética é freqüentemente desprezada e as propriedades físicas, particularmente a densidade, são consideradas constantes. Para escoamentos de gases e vapores, essa hipótese somente é válida para pequenas variações da pressão e baixas velocidades (menor do que 0,3 vezes a velocidade do som no gás). Desta forma, na imensa maioria dos casos em unidades de processo, a energia contida no gás ou vapor como resultado da pressão é convertida em energia cinética conforme os mesmos escapam e se expandem através do orifício. A massa específica, a pressão e a temperatura mudam enquanto o gás ou o vapor passa pela ruptura, caracterizando-se como um escoamento compressível (Crowl *et al.*, 2002).

Em simulações de dispersões gasosas por CFD, adota-se que se o número de Mach é inferior a 0,3 em todos os pontos da região a ser simulada, então, o escoamento pode ser assumido como incompressível. Porém, se o escoamento é sônico ou supersônico em algumas regiões, como ocorre com liberação de gás ou vapor a altas pressões, ele deve ser tratado como compressível, ou, então, podem ser necessárias hipóteses simplificando este tipo de escoamento (HSL, 1997 e 2003).

As descargas de gás ou vapor em orifícios são classificadas como sendo liberações de expansão livre. Nesse tipo de liberação, a maior parte da energia devido à pressão é convertida em energia cinética, sendo a hipótese de comportamento isentrópico (expansão isentrópica) frequentemente válida (Crowl *et al.*, 2002).

A vazão mássica para o vazamento de gás ou vapor através de um orifício durante a expansão isentrópica pode ser estimada pela equação geral a seguir (TNO, 2005):

$$q_s = C_d A_h \psi \sqrt{\left(\rho_0 P_0 \gamma \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\left(\frac{\gamma+1}{\gamma-1} \right)} \right)} \quad (kg/s) \tag{2.1}$$

onde:

$q_s =$ vazão mássica de gás [kg/s];

$C_d =$ coeficiente de descarga [-];

$A_h =$ área transversal do orifício [m²];

$\psi =$ coeficiente de escoamento [-];

$\rho_0 =$ densidade do gás a montante do vazamento [kg/m³];

$P_0 =$ pressão do gás a montante do vazamento [N/m²];

$\gamma =$ relação entre os calores específicos a p e v constantes (Cp/Cv) [-].

O coeficiente de escoamento, Ψ, é definido pelas equações abaixo em função da característica de escoamento do gás, ou seja, se o escoamento é crítico (*choked*) ou sub-crítico (TNO, 2005):

Para escoamento crítico, o valor de Ψ é dado pela seguinte equação:

$$\psi = 1 \tag{2.2}$$

No caso de escoamento sub-crítico, o valor de Ψ é dado pela seguinte equação:

$$\psi^2 = \frac{2}{\gamma - 1} \times \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{\left(\frac{\gamma+1}{\gamma-1} \right)} \times \left(\frac{P_a}{P_0} \right)^{\frac{2}{\gamma}} \times \left(1 - \left(\frac{P_a}{P_0} \right)^{\left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \right)} \right) \tag{2.3}$$

O escoamento é considerado crítico quando:

$$\frac{P_0}{P_a} \geq \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{\left(\frac{\gamma}{\gamma-1} \right)} \tag{2.4}$$

onde P_a é a pressão atmosférica.

Para a maioria dos gases, a relação C_p/Cv, ou coeficiente isentrópico, varia de $1{,}1 < \gamma < 1{,}4$, e o escoamento será crítico quando $P_0/P_a > 1{,}9$.

A pressão crítica, P_c ou P_{choked}, é a máxima pressão que resulta na máxima vazão através do orifício. Para pressões a jusante menores que P_{choked}, as seguintes afirmações são válidas:

A velocidade do fluido no ponto do vazamento é a velocidade do som nas condições locais; e a velocidade e a vazão mássica não podem aumentar mais reduzindo-se a pressão a jusante: elas são independentes das condições a jusante. Este tipo de escoamento é denominado, como já mencionado, crítico, sônico ou estagnado, sendo ilustrado pela Figura 3 (Crowl *et al.*, 2002).

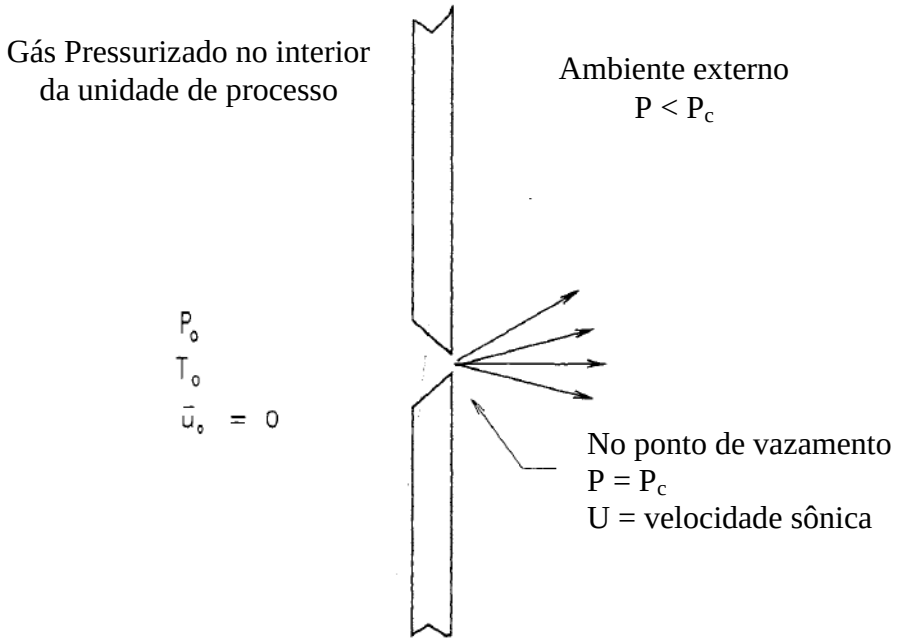


Figura 3: Escoamento crítico de gás através de orifício (adaptado de Crowl *et al.*, 2002).

Na Equação 2.4, substituindo P_a por P_{choked}, e considerando gases ideais, P_{choked} é função apenas das razões entre os calores específicos.

Desta forma, para gases ideais diatômicos como o hidrogênio (H_2), onde $\gamma \cong 1{,}4$:

$$P_{choked} = 0{,}528 P_0 \tag{2.5}$$

Cabe ressaltar que as condições de processo que levam a escoamentos críticos são muito comuns em unidades de processo.

O coeficiente de descarga, C_d, é determinado por dois fatores: o coeficiente de fricção (C_f) e o coeficiente de contração (C_c), de acordo com a seguinte relação (TNO, 2005):

$$C_d = C_f C_c \tag{2.6}$$

A contração consiste em um fenômeno causado pelo fato do gás fluir para o orifício vindo de todas as direções, tendo uma componente de velocidade perpendicular ao eixo da abertura. O fluido deve ser curvado na direção paralela ao eixo do orifício. A inércia do fluido resulta em uma área transversal menor, sem aceleração radial, que é menor que a área da abertura.

Para orifícios regulares, há a contribuição do fenômeno da contração, porém, a fricção é desprezível. Desta forma, o valor recomendado para o coeficiente de descarga, C_d, é de 0,62 (Beek *et al.*, 1975 e TNO, 2005). Da mesma forma, Cox *et al*. (2003) também definiram que o coeficiente de descarga em orifícios é 0,62.

No entanto, por margem de segurança, será adotado o valor de:

$$C_d = 0{,}65 \tag{2.7}$$

Temos ainda que para qualquer gás ideal numa expansão isentrópica (Crowl *et al.*, 2002):

$$\rho = \rho_0 \left(\frac{P}{P_0} \right)^{1/\gamma} \tag{2.8}$$

De acordo com HSL (2005), a temperatura crítica, T_c, no ponto de vazamento pode ser obtida pela seguinte equação:

$$\frac{\rho_0}{\rho_C} = \left(\frac{T_0}{Tc} \right)^{1/(\gamma-1)} \tag{2.9}$$

onde: T_0 = temperatura absoluta a montante do vazamento (K).

Para escoamentos críticos, a velocidade do gás na abertura da descarga é igual à velocidade do som, a qual pode ser calculada pela seguinte equação (ABNT, 2009):

$$V_S = \sqrt{\gamma \frac{RT_0}{M}} \tag{2.10}$$

Para gás ideal: P = ρRT/M. Desta forma, a Equação 2.10 também pode ser escrita da seguinte forma:

$$V_S = \sqrt{\gamma \frac{P_0}{\rho}} \tag{2.11}$$

Schefer *et al*. (2007) apresentam valores, em diferentes pressões, do fator de compressibilidade (Z) para o hidrogênio a 27 °C (300 K), e afirmam que as relações isentrópicas podem ser diretamente aplicadas para vazamentos em tanques a baixas pressões, e que em pressões de até 172 bar o gás pode ser tratado, com boa aproximação, como ideal, podendo ser adotado o valor de Z igual a 1,0.

Sendo assim, por questões de simplificação, e como as pressões em todas as simulações do presente trabalho estão limitadas a, no máximo, 100 bar, a consideração de gás ideal para o hidrogênio será adotada.

2.2. Modelos de Dispersão Atmosférica

Ferramentas de modelagem da dispersão atmosférica têm sido publicadas por várias instituições como forma de predizer, de acordo com os cenários de vazamento, a conseqüência desta dispersão. Existem três tipos principais de modelos de dispersão incorporados nestas ferramentas (Miyata e Mori, 2011):

- Modelos que simplesmente definem distâncias e áreas impactadas devido a uma determinada taxa de vazão mássica de uma dada substância tóxica ou inflamável;
- Modelos que calculam a distribuição da concentração da substância na atmosfera em plumas gaussianas, de acordo com fórmulas de dispersão e coeficientes empíricos;
- Modelos que definem a distribuição da concentração em três dimensões, por simulação numérica das equações de conservação, utilizando códigos de CFD.

Na avaliação dos efeitos devido à dispersão atmosférica, um modelo adequado deve ser selecionado de acordo com as circunstâncias desta dispersão. Quando as conseqüências da

dispersão atmosférica estão numa faixa da ordem de 100 metros (m) a 10 quilômetros (km), a área de cálculo (domínio) é suficientemente grande quando comparada aos tamanhos das obstruções. Para estes casos o modelo gaussiano pode ser usado.

Por outro lado, ao direcionar as conseqüências da dispersão para uma escala relativamente pequena, como unidades de processo de plantas químicas e petroquímicas ou plataformas de petróleo, por exemplo, devem-se considerar, obrigatoriamente, as perturbações nos campos de velocidade de vento devido às obstruções, tais como, prédios, equipamentos, tanques de armazenamento, etc. Nestes casos, as avaliações devem ser conduzidas utilizando modelos tridimensionais, através de CFD (Miyata e Mori, 2011).

2.3. Determinação do Diâmetro do Orifício de Vazamento

Para a correta definição do diâmetro do orifício do vazamento, tomando sempre a precaução de tentar simular uma condição que reflita uma situação real na planta, são necessárias algumas observações.

Interessa, principalmente, detectar vazamentos que possam alimentar incêndios ou formar nuvens explosivas que poderão movimentar-se pela planta, com fluxo pequeno, porém, constante de gás. Este tipo de vazamento é limitado pela vazão mássica de gás que escoa pelo equipamento.

Diferentes deste tipo de vazamento seriam as liberações provocadas por rupturas ou falhas da linha, com vazamento instantâneo, porém por um curto espaço de tempo. Nestes eventos o inventário liberado, bem como as nuvens formadas seriam de maiores dimensões e, desta forma, mais facilmente percebidas e detectadas, quer pela rede de detectores ou pelos próprios controles de operação existentes: pressostatos de baixa, medidores de fluxo, sentidos humanos de visão e audição, etc.

Torna-se, portanto, evidente que vazamentos com pequenas vazões são mais críticos sob o ponto de vista da detecção (Strϕm e Bakke, 1999, Kelsey *et al*., 2002 e Fleck, 2008).

A definição do tamanho do orifício de vazamento deve levar em consideração todos estes aspectos, de forma a aproximar o projeto final de locação dos detectores às situações reais de vazamento. Entretanto, não há, até o momento, um critério universalmente aceito a respeito de qual diâmetro do orifício de vazamento devemos considerar (Fleck, 2008).

Desta forma, o tamanho do orifício é sugerido conforme a literatura técnica de taxa de falhas.

Os estudos do HSE (1997 e 1999) consideram o tamanho do furo através de uma distribuição em seis faixas de diâmetro: $\phi < 10$ mm, 10 mm $< \phi <$ 25 mm, 25 mm $< \phi <$ 50 mm, 50 mm $< \phi <$ 75 mm, 75 mm $< \phi <$ 100 mm e $\phi \geq 100$ mm.

A OGP (2010) aborda para *risers* e dutos tanto *onshore*, quanto *offshore*, três faixas de diâmetros de furo: pequeno, médio e grande. Estas faixas estão definidas como $\phi < 20$ mm, 20 mm $\leq \phi \leq$ 80 mm e $\phi >$ 80 mm, respectivamente.

Para instalações que podem ser consideradas como tanques atmosféricos ou tanques pressurizados, vazamentos devem ser incluídos no cálculo do diâmetro representativo de vazamento (LNE, 2009). A Figura 4 representa a distribuição dos diâmetros de vazamento pela freqüência, por ano, da ocorrência do vazamento para tanques pressurizados.

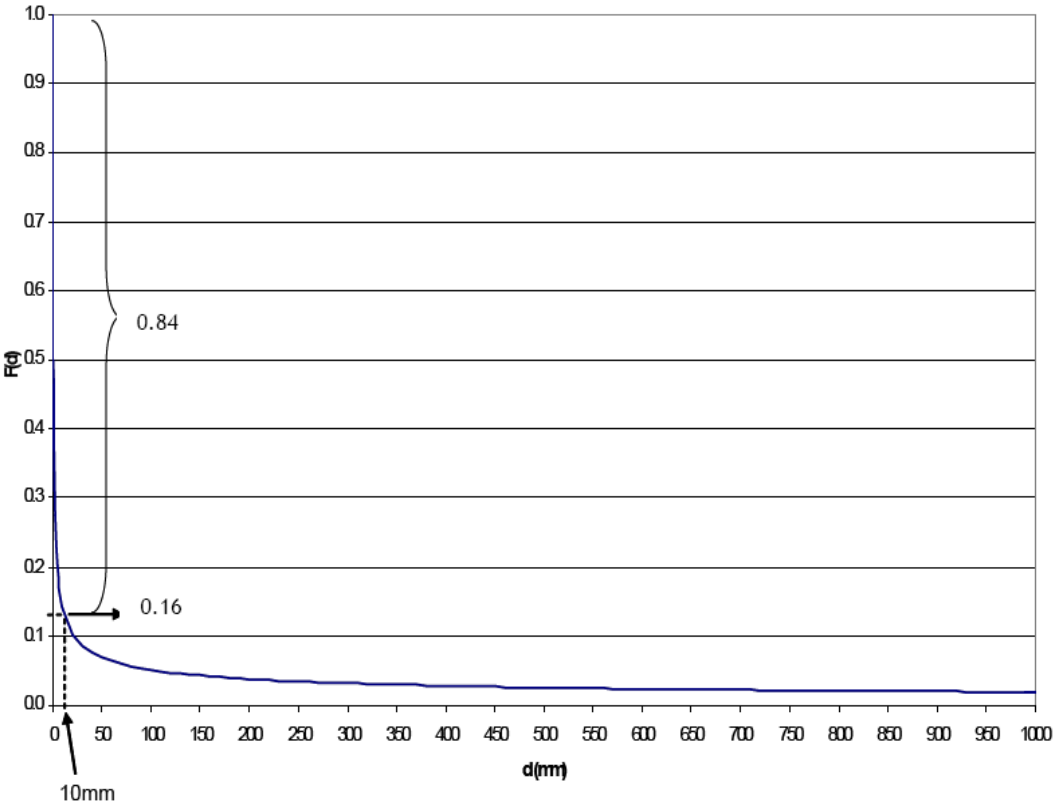


Figura 4: Distribuição dos diâmetros de vazamento (LNE, 2009).

Conforme pode ser observado, 84% dos vazamentos ocorrem em diâmetros de até 10 mm. Levando em consideração a falta de confiabilidade da distribuição neste intervalo, o

diâmetro equivalente de vazamento é igualado ao valor máximo do intervalo, 10 mm (LNE, 2009).

HSE (2001) apresenta dados de taxas de falhas de vários equipamentos em sistemas *offshore*, por distribuição dos tamanhos dos orifícios e sua freqüência de ocorrência. Fleck (2008), subsidiado por esses dados, adotou o diâmetro de furo de 10 mm para o cálculo da vazão mássica de gás liberado em seu estudo de dispersão de gases.

2.4. Escoamentos Sônicos x Subsônicos (compressíveis x incompressíveis)

Se o número de Mach (Ma) é inferior a 0,3 em qualquer ponto da região a ser simulada, o escoamento pode ser assumido como incompressível. Porém, se o escoamento for sônico ou supersônico em algumas regiões, por exemplo, como conseqüência da liberação de gás a alta pressão, algoritmos especiais provavelmente serão necessários para se obter a solução correta (HSL, 1997).

Corroborando a informação acima, HSL (2003) afirma que somente se Mach for inferior a 0,3 em todo o domínio é que o escoamento poderá ser simulado como incompressível e que, de maneira geral, é recomendado que as simulações sejam conduzidas considerando escoamentos compressíveis, visto que os pacotes mais modernos de CFD conseguem modelar estes escoamentos sem qualquer perda de eficiência.

Como já comentado, nos locais onde existe uma redução significativa da pressão, isto é, da condição de estagnação para a pressão ambiente, o gás escoa com a velocidade do som e o escoamento é dito crítico (*choked*). A estrutura inicial do jato contém uma série de ondas de choque. O jato apresenta uma corrente sônica e passa por uma transição para uma região totalmente desenvolvida na qual a variação radial da velocidade axial é aproximadamente uma gaussiana (HSL, 2005). Na Figura 5, o subscrito *2* denota as condições onde o escoamento já está totalmente desenvolvido e este passa a ser considerado subsônico.

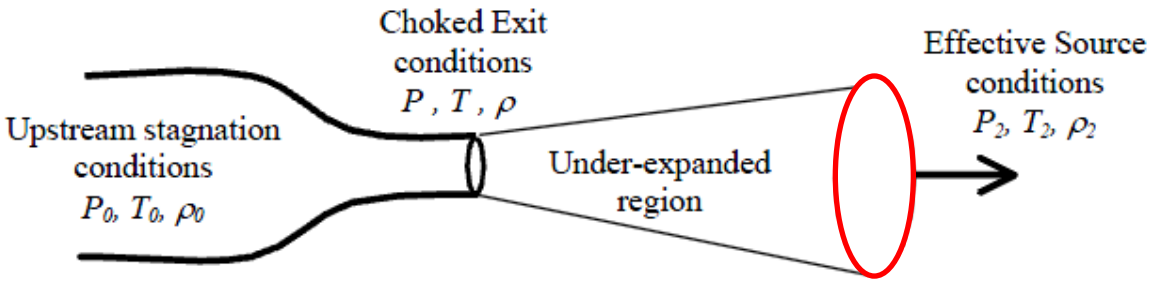


Figura 5: Esquema de desenvolvimento do jato sob condições sônicas de escoamento (adaptado de HSL, 2005).

Uma alternativa para não se ter que resolver o escoamento sônico nos estágios iniciais do vazamento, ou seja, na *under-expanded region* (região sub-expandida), é usar a aproximação da 'fonte sônica resolvida' (*pseudo-source* ou tronco de cone). Isto consiste em modelar o vazamento somente após a região de ocorrência das ondas de choque e da região sub-expandida, quando o escoamento sônico estiver totalmente desenvolvido, e o escoamento já é considerado como subsônico. É assumido, ainda, que não ocorrerá entrada de ar entre a saída do jato até o término da região sub-expandida (HSL, 2005).

Desta forma, o escoamento seria simulado somente a partir da região destacada em vermelho na Figura 5, sendo a mesma denominada de *pseudo-source*, ou tronco de cone, em referência à forma geométrica formada entre o verdadeiro ponto de liberação e a *pseudo-source*. Para isso, correlações empíricas são necessárias para definir parâmetros de fluxo para o jato neste ponto.

Segundo HSL (2005), a conservação de massa pode ser aplicada no ponto onde o escoamento passa a ser subsônico:

$$\rho_C A_C V_C = \rho_2 A_2 V_2 \tag{2.12}$$

O subscrito *c* significa as condições críticas (ou de *choked*), isto é, no ponto real que ocorre o vazamento, e o subscrito *2*, como comentado, onde o escoamento passa a ser subsônico, considerado como sendo as condições atmosféricas.

A área da *pseudo source*, transversal ao jato, pode ser estimada por (HSL, 2005):

$$A_2 = \frac{A_C P_C}{P_2} \tag{2.13}$$

E, conforme TNO (2005) e Schefer *et al*. (2007), a velocidade da *pseudo source* será:

$$V_2 = V_C + \frac{P_C - P_2}{\rho_C V_C} \tag{2.14}$$

Como P_c é maior que a pressão atmosférica, P_2, o segundo termo do lado direito da equação será sempre positivo. Assim, como consequência, e devido às ondas de choque, a velocidade necessariamente será maior do que a velocidade no ponto real de liberação.

Esta mesma alternativa de uso do tronco de cone também é proposta por TNO (2005), quando afirma ser necessária a determinação de uma *pseudo source*, a qual seja consistente com o modelo de jato, e que pode ser usada para substituir o complexo escoamento sônico quando o jato se expande para a atmosfera, após a sua liberação.

Desta forma, com o uso do tronco de cone nos orifícios de vazamento espera-se, a priori, que a simulação numérica seja facilitada, à medida que o escoamento se dará em condições subsônicas (Fleck, 2008).

De acordo com Fleck (2008), esta simplificação não implica em mudanças nos perfis (ângulos) de escoamento do jato.

2.5. Alocação de Detectores de Gás

Após as simulações numéricas por CFD e a consequente obtenção das nuvens com a concentração dos gases, uma etapa fundamental ainda precisa ser efetuada: a avaliação do posicionamento dos detectores de gás, ou seja, a definição da localização (coordenadas x, y, z) onde os detectores serão alocados e da quantidade de detectores necessária para proteção de determinada área.

Existem várias estratégias disponíveis na literatura para o processo de avaliação do posicionamento de detectores para a proteção de locais onde podem ocorrer vazamentos de gás. Duas dessas estratégias são apresentadas a seguir:

2.5.1. Kelsey *et al*. (2002)

Dados de medidas experimentais de dispersão de gás natural, em ambiente com ventilação natural, liberados à alta pressão, num módulo de processo *offshore* medindo 28 x

12 x 6 metros (m) foram utilizados para avaliar a eficiência da orientação de se alocar detectores de gás em uma rede (malha) de detectores espaçada de 5 x 5 m.

Segundo HSE, 1993 (apud Kelsey *et al*., 2002), esta orientação de espaçamento de 5 x 5 m é uma prática industrial normalmente aceita, e é derivada de estudos que mostram que para uma nuvem de gás inflamável (metano) de 6 m de diâmetro, em ambientes não confinados, a velocidade de chama não excede 100 m/s e a sobrepressão não é superior a 150 mbar (0,15 atm). Esses valores são considerados abaixo daqueles que poderiam causar danos quando esta nuvem sofre ignição. Porém, em locais com alto grau de confinamento, a velocidade de chama pode exceder 125 m/s para uma nuvem de 6 m, requerendo uma redução no espaçamento dos detectores.

Para uma primeira análise, foram propostos dois níveis de detectores[3] pontuais, um nível a 3,9 metros de altura (abaixo do mezanino) e outro nível a 6,9 metros de altura (abaixo do teto), numa malha espaçada de 5 metros, originando, assim, 24 detectores pontuais, 12 para cada nível. Como forma de avaliar a eficácia de diferentes tipos de detectores, foram usados 24 detectores pontuais catalíticos e 24 detectores pontuais de infravermelho (IR), além de 4 detectores de visada (*open-path*), estes últimos não respeitando o espaçamento de 5 metros.

Apesar de não ser informado pelos autores, supõe-se que a escolha das alturas dos níveis se deu pelo fato do gás natural ser menos denso que o ar e num eventual vazamento ele terá um movimento ascendente.

O estudo mostrou que o detector pontual de IR detectou, no nível de alerta, todos os vazamentos antes da formação de uma nuvem explosiva de 6 m de diâmetro. A mesma rede de detectores catalíticos, assim como a rede de detectores de visada, não obtiveram o mesmo sucesso, 93% e 88%, respectivamente. Já para o nível de alarme (gás confirmado), todas as 3 redes não conseguiram detectar todos os casos, 83% para IR, 60% para catalítico e 68% para visada.

O efeito na mudança da malha, ou seja, do espaçamento entre os detectores e, consequentemente, do número de detectores, também foi avaliada pelos autores. Dobrando a distância, isto é, 10 m x 10 m, resultou em uma malha com 3 detectores (um oitavo do numero padrão) e um aumento significativo no tempo de resposta. Por outro

[3] A definição de detectores e seus tipos são abordados na seção 3.1.

lado, reduzindo a distância a metade, 2,5 m x 2,5 m, elevou-se para 192 o número de detectores e uma pequena melhora no tempo de detecção, mostrando que a malha padrão, 5 m x 5 m, se aproxima do número ótimo e do espaçamento entre detectores.

Os autores, no entanto, não otimizaram a quantidade de pontos de detecção da malha inicialmente proposta de detectores, equidistantes de 5 m, e também não discutiram a criticidade da direção da liberação dos cenários simulados, ou seja, a localização do vazamento no equipamento (Fleck, 2008).

2.5.2. Miyata e Mori (2011)

Miyata e Mori (2011) desenvolveram um método para o posicionamento de detectores de gás em uma planta química, dividido nas seguintes etapas:

- Identificação dos locais de vazamento e alocação inicial dos detectores: equipamentos que manuseiam gases inflamáveis ou tóxicos e que apresentam histórico de vazamentos, tais como: compressores, reatores, tanques de armazenamento, juntas em tubulações, entre outros, são mapeados. De acordo com o arranjo desses equipamentos na planta e a experiência do profissional, é feita uma proposta de alocação inicial dos detectores.
- Determinação da vazão mássica de liberação de gás: simulações de dispersões são realizadas variando a taxa de liberação, sendo que a escolhida é a menor vazão mássica (*threshold release rate*) tal que a concentração ERPG-2[4] não ultrapassará as fronteiras do *site* quando o gás em questão vaza de qualquer ponto no interior do *site*.
- Avaliação da localização dos detectores de gás: baseado na *threshold release rate*, são realizadas as simulações para cada ponto de vazamento (num total de 12 simulações: 3 pontos de vazamento e 4 direções de vento), variando as condições atmosféricas, e são avaliadas as concentrações nos pontos onde os detectores estão localizados.
- Confirmação da detecção por múltiplos detectores: objetivando aprimorar a confiabilidade do sistema de detecção, é desejável que, após a realização de todas as simulações das dispersões atmosféricas, qualquer vazamento possa ser detectado por mais de um detector. Quando esta condição é atingida, independente das condições atmosféricas, julga-se que a

[4] ERPG-2 – É a máxima concentração de determinado gás no ar abaixo da qual acredita-se que todos os indivíduos possam ficar expostos por até uma hora sem desenvolver danos irreversíveis ou outros efeitos adversos à saúde, ou ainda, sintomas que possam impedir a habilidade individual de tomar medidas de proteção (Miyata e Mori , 2011).

localização ideal dos detectores foi atingida, e o estudo é encerrado. Caso contrário, mais uma etapa se faz necessária.

- Reavaliação da localização dos detectores: A alocação dos detectores é concluída repetindo-se a penúltima etapa, ou seja, avaliação das concentrações nos pontos, realocando-se detectores quando necessário, até que o número de detectores na etapa anterior seja, de no mínimo, dois.

Apesar de terem sido conduzidas 12 simulações, apenas 6 delas foram utilizadas para o trabalho de avaliação do posicionamento dos detectores, sendo excluídas as simulações com os ventos norte e leste.

Pelo próprio exemplo apresentado pelos autores no trabalho, percebe-se que, apesar de todos os 6 casos terem sido detectados após a realização das etapas acima, existe ao menos um detector que não foi responsável pela detecção de nenhuma nuvem e que mesmo assim não foi excluído, ou seja, este detector não contribui em nada para o sistema de detecção, aumentando-se apenas o custo, tanto de instalação, quanto de manutenção.

3. DETECÇÃO DE GASES

Em plantas químicas, petroquímicas e plataformas de petróleo, planos de resposta a emergências devem ser elaborados de forma a prevenir que incidentes, como vazamentos de gás, tornem-se acidentes graves. A detecção de gás, portanto, é um item importantíssimo na elaboração do plano de emergência, uma vez que pode auxiliar numa evacuação mais célere dos trabalhadores e também para que medidas mitigadoras possam ser tomadas numa brevidade maior.

De maneira geral, os sistemas de detecção de gases são utilizados para garantir:

- Segurança das pessoas – Esses sistemas têm a intenção de assegurar que a exposição às concentrações inflamáveis ou tóxicas estará dentro dos limites permissíveis e que as pessoas serão alertadas de liberações perigosas;
- Proteção da propriedade – Esta proteção é garantida pela detecção e pela prevenção de cenários que poderiam levar a incêndios ou explosões;
- Minimização dos impactos à comunidade – Pode ser usual detectar vazamentos e evitar que grandes liberações atinjam as comunidades localizadas fora dos limites da planta;
- Atendimento aos requisitos Legais – Para garantir ou provar que as concentrações se encontram abaixo dos níveis regulamentares para a segurança dos trabalhadores e das comunidades vizinhas.

É importante frisar que, apesar da sua evidente importância, esses sistemas nunca devem substituir um bom projeto de arranjo da planta, bem como as manutenções preventivas dos equipamentos, isto porque, por melhor que seja conduzido um estudo de dispersão de gases e a avaliação do posicionamento dos detectores, como há muitos fatores que influenciam o escoamento desses gases, existe, mesmo que remota, a probabilidade de vazamentos não serem detectados. Por outro lado, a maioria das condições de falha a que os equipamentos estão sujeitas é conhecida. Logo, a correta seleção, projeto, e manutenção desses equipamentos podem reduzir a probabilidade da ocorrência de vazamentos.

3.1. Detecção de Vazamento

Os detectores de gases são equipamentos que detectam liberações de produtos inflamáveis ou tóxicos, indicando a sua concentração e emitindo alarmes, podendo ser divididos em detectores fixos e portáteis.

A razão do uso de detectores fixos é que eles podem estar permanentemente localizados numa determinada área de potencial liberação de gases, monitorando o ambiente. Conforme CCPS (2009), se as pessoas precisam ser avisadas da formação da atmosfera inflamável ou tóxica, os detectores fixos fornecem a maneira mais rápida para esta notificação. Os detectores portáteis, via de regra, são utilizados quando da necessidade de se executar um trabalho num local com possível presença ou formação de gás inflamável ou tóxico, oriunda da própria tarefa ou não, e também para a entrada em espaços confinados. Enquanto a tarefa é executada, o trabalhador monitora a concentração do ambiente, e com qualquer sinal de concentrações fora da normalidade, ele pode interromper a atividade e abandonar a área.

Dentre os detectores fixos, podemos ter os do tipo pontual (*point*), que medem a concentração de gás no ponto de amostragem do próprio instrumento ou do tipo visada (*open-path*), que consiste de um emissor de infravermelho e um receptor. Quando sensibilizado por uma nuvem de gás, os raios que chegam ao receptor apresentam distorções em relação à condição normal, possibilitando o cálculo da concentração do gás.

Os detectores de visada, pelas suas próprias características, apresentam a vantagem de reduzir o número de detectores que seriam necessários para a proteção de determinada área, podendo ficar espaçados a uma distância de até 150 metros e cobrindo uma região muito maior do que os pontuais. São muito utilizados, por exemplo, em parques de armazenamento de gás liquefeito de petróleo (GLP). Por outro lado, não podem existir obstruções físicas no caminho entre os emissores e receptores, e eles não devem ser instalados em estruturas sujeitas à vibração, pois os mesmos precisam estar perfeitamente alinhados.

Existem diferentes tipos de sensores usados na detecção de gás. A escolha do sensor dependerá do gás a ser detectado, da faixa de concentração esperada, se o detector é pontual ou de visada, e se há presença de outros gases que podem afetar as leituras ou danificar o sensor (Fleck, 2008).

3.2. Limites de Inflamabilidade e Níveis de Ação

Misturas de ar e vapor (ou gás) combustível somente formarão misturas inflamáveis, e poderão sofrer ignição ou queima, se estiverem dentro de limites bem definidos de

composição, chamados de Limite Inferior de Inflamabilidade (LII) e Limite Superior de Inflamabilidade (LSI). Essas misturas são expressas em percentagens em relação ao volume de gás ou vapor no ar.

O LII é a menor concentração de um combustível, no volume total da mistura com o comburente (ar), que permite a propagação da chama. Já o LSI é a maior concentração de um combustível, no volume total da mistura com o comburente, que permite a propagação da chama.

Quando a concentração do combustível na mistura se encontrar abaixo do LII, a mesma é chamada de mistura pobre, e quando se encontra acima do LSI, mistura rica, sendo que nessas condições não existe a possibilidade de ignição da mistura.

Os limites de inflamabilidade sofrem influência de alguns parâmetros, como temperatura e pressão. Com o aumento da temperatura o LII diminui e o LSI aumenta, ou seja, o intervalo entre os limites se torna maior. Para a pressão, observa-se pouca variação do LII com o seu aumento, no entanto o LSI aumenta significativamente.

Cada gás ou vapor possui o seu limite de inflamabilidade. Para o hidrogênio, por exemplo, estes valores são da ordem de 4,0% e 75% para o LII e o LSI, respectivamente.

Para determinar os níveis requeridos para sistemas de detecção fixos de gás, devem ser levados em consideração quaisquer recomendações e padrões industriais, o limite inferior de inflamabilidade do gás ou do vapor, o tamanho do vazamento potencial, o tempo para atingir uma situação perigosa, se a área está ocupada, o tempo requerido para a resposta do alarme, as ações a serem tomadas seguindo o alarme e a toxicidade do gás ou vapor (HSE, 2004 apud Fleck, 2008).

Um dos princípios que devem balizar a escolha do nível de ação é a de que este não deve ser em 100% do LII, pois, neste caso, a mistura inflamável já estaria formada, e qualquer fonte de ignição dentro desta nuvem causaria o incêndio ou a explosão. Em unidades *onshore* da PETROBRAS têm-se adotado, para os detectores pontuais de gás, dois níveis de detecção:

- Nível de alerta, em 20% do LII, que age como um alerta de um possível problema potencial que requer investigação;

- Nível de alarme ou de gás confirmado, em 60% do LII, onde a presença de gás é dada como certa e medidas de mitigação, como evacuação, corte de inventário, entre outras, devem ser tomadas.

Em unidades *offshore* costuma-se adotar os valores de 20% do LII para o nível de alerta e 50% do LII para o nível de gás confirmado.

Para gases tóxicos também são aplicáveis os níveis de ação acima descritos, porém, os valores variam de acordo com a toxicidade de cada gás. Para o gás sulfídrico (H_2S), por exemplo, adotam-se 8 ppm e 20 ppm, para os níveis de alerta e de gás confirmado, respectivamente.

Fica fácil perceber que reduzindo os valores dos níveis de ação, menores seriam os tempos de detecção e mais rápidas poderiam ser as ações de mitigação. No entanto, esta redução levaria a muitos alarmes espúrios, pois praticamente qualquer emanação, um alívio de uma válvula de segurança (PSV), por exemplo, seria considerada como vazamento, levando à mobilização desnecessária da equipe organizacional de resposta a emergências.

Em unidades *offshore* da PETROBRAS, como o sistema de detecção é intertravado aos sistemas de parada de emergência da plataforma, ou seja, havendo gás confirmado na área são desencadeadas, automaticamente, diversas ações objetivando uma parada segura do processo e demais equipamentos da unidade, existem lógicas de votação que têm por objetivo evitar uma parada de emergência de maneira desnecessária. Uma lógica de votação 2 ∞ 3 (2 de 3), por exemplo, significa que a confirmação de gás só se dá quando dois (02) dos três (03) detectores foram atuados.

Nas unidades de terra da PETROBRAS, como regra geral, a filosofia é de não haver qualquer intertravamento do sistema de detecção de incêndio e de gás ao processo. Desta forma, não existe qualquer lógica de votação, e tão logo um (01) detector acuse gás confirmado na área é enviado alarme para o centro integrado de controle (CIC) e acionado alarme sonoro/visual no campo para que as ações mitigadoras possam ser executadas.

4. FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)

4.1. Introdução

A fluidodinâmica computacional (CFD), também chamada de dinâmica dos fluidos computacional, é o estudo dos fenômenos de transporte que envolve escoamento de fluidos, transferência de calor, transporte de massa e reações químicas, utilizando métodos matemáticos, numéricos e computacionais. Em outras palavras, a solução analítica das equações de conservação de quantidade de movimento, de massa e de energia só é possível para escoamentos simples. Na resolução de problemas reais, muito mais complexos, lança-se mão do uso desses métodos para a resolução das equações de conservação.

A ferramenta de CFD, portanto, mostra-se muito poderosa, podendo ser utilizada em diversas aplicações industriais ou não, tais como: aerodinâmica de aeronaves e veículos, hidrodinâmica de navios, combustão de turbinas a gás, processos químicos (mistura e separação), engenharia ambiental (dispersão de poluentes e efluentes), meteorologia (previsão do tempo) e engenharia biomédica (fluxo de sangue nas artérias e veias) (Malalasekera e Versteeg, 1995).

Além disso, sua crescente aplicação pode ser justificada pelas seguintes razões (Alves, 2012):

- estudos que envolvem riscos quanto à realização experimental, tais como altas temperaturas, pressões e materiais tóxicos;
- quando a montagem de uma planta experimental ou modelos em escala se tornam muito caros ou de difícil elaboração, como túneis de vento e estudos de vazamento de produtos tóxicos em plataformas de petróleo, plantas químicas ou nucleares;
- as simulações numéricas oferecem mais detalhes que experimentos reais, pois o número de pontos de medição das simulações numéricas está associado aos pontos da malha, enquanto que os experimentais necessitariam de vários medidores.
- avanço contínuo no poder computacional e na assimilação de novos métodos disponibilizados na literatura;
- minimização de custos em relação a experimentos convencionais, principalmente para aplicações acadêmicas onde os pacotes comerciais são de menor custo;

- melhora para o ensino de engenharia, pois permite que uma grande quantidade de alunos tenha contato com experimentos computacionais que seriam de difícil demonstração durante as aulas;
- facilidade no processo de otimização de equipamentos, pois algumas vezes a construção do equipamento é muito cara e de difícil adaptação para o estudo de variáveis geométricas ou condições de processo.

Por outro lado, é importante salientar que projetos envolvendo o uso de solução CFD não retiram a importância da análise teórica e da necessidade de realização de procedimentos experimentais. A análise teórica é importante para se conhecer os modelos matemáticos que serão adotados, assim como, as hipóteses simplificadoras utilizadas para a resolução do problema numérico. Uma solução analítica simplificada pode ser empregada como condição inicial para a resolução de problemas mais complexos. Já os resultados experimentais servem tanto para avaliar a adequação dos resultados aos modelos numéricos (validação física), quanto para a elaboração de novos modelos. Logo, embora as simulações numéricas apresentem constantes aperfeiçoamentos, estas não substituem os estudos experimentais (HSL, 2003 e Alves, 2012).

Há de se ter em mente, também, que erros gerados na solução numérica podem levar a pouca ou nenhuma representatividade da solução, quando comparada com a realidade física (Fleck, 2008). Isso significar dizer que o modelo matemático adotado no problema precisa representar o fenômeno físico o mais próximo possível da realidade. Outrossim, o método numérico adotado precisa resolver corretamente as equações algébricas geradas com a discretização do domínio.

4.2. Etapas de uma Simulação de CFD

Ao se iniciar um projeto de CFD, o problema deve ser avaliado para se saber quais são as variáveis mais importantes no processo e quais podem ser simplificadas ou até mesmo descartadas frente a outras envolvidas, além da determinação dos limites de estudo do problema.

Desta forma, o domínio, isto é, a região de aplicação e validade das equações, é definido, bem como o problema físico deve ser modelado matematicamente, sendo expresso na forma das leis de conservação de momento, massa e energia. Esses modelos

irão explicar o sistema estudado, além de prever seu comportamento em diferentes situações.

Segundo Malalasekera e Versteeg (1995), os códigos de CFD são estruturados em torno de algoritmos numéricos que podem resolver problemas de escoamentos de fluidos, contendo três elementos principais: (i) um pré-processador, isto é, definição da geometria (domínio computacional), geração da malha (subdivisão do domínio) e definição dos *settings* (parâmetros) e condições de contorno; (ii) um processador ou *solver*, e (iii) um pós-processador. A Figura 6 apresenta as principais etapas na resolução de um problema de CFD, através do programa CFX da ANSYS, que será utilizado neste trabalho.

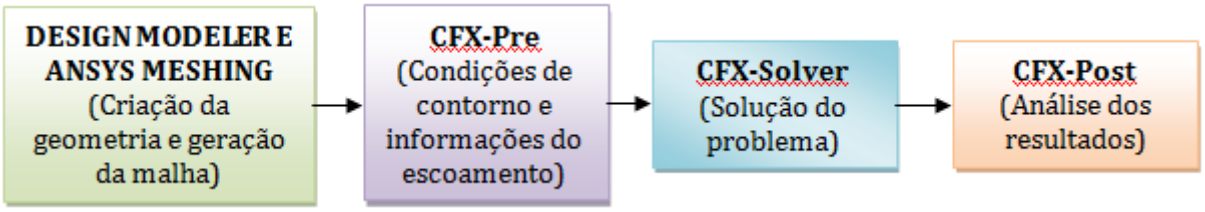


Figura 6: Etapas de uma simulação de CFD utilizando o programa CFX da ANSYS (ANSYS 13.0 Help, 2011).

A geometria da região de interesse deve ser criada através do programa Design Modeler (ou ICEM para o caso de geometrias hexaédricas) ou, em algumas situações, ela também pode ser importada, já construída, de outros programas de desenho. Posteriormente, como não é possível obter soluções numéricas sobre uma região contínua, devido aos infinitos pontos da mesma, é necessário que o domínio seja discretizado, ou seja, ele é dividido em um número finito de pontos (nós) onde as equações são calculadas, e somente nesses pontos as soluções serão obtidas. Esta é a etapa de geração da malha, feita através do programa ANSYS Meshing. Num projeto industrial com uso de CFD, mais de 50% do tempo é dedicado a estas duas etapas, ou seja, criação da geometria e geração da malha (Malalasekera e versteeg, 1995).

Assim como o domínio precisa ser discretizado, as equações também precisam de uma transformação equivalente. Sendo assim, as equações deixam de ser resolvidas através de equações diferenciais, substituindo-se as derivadas por expressões algébricas, já que o domínio passou a ser discreto (Schäfer, 2006 apud Alves, 2012).

No CFX-Pre, o usuário tem como tarefas: selecionar os fenômenos físico-químicos que precisam ser modelados, definir as propriedades dos fluidos e especificar as condições de contorno apropriadas para as células que tocam ou coincidem com os limites do domínio.

Para a resolução do problema, no *solver*, existem três técnicas de solução numérica: diferenças finitas, elementos finitos ou volumes finitos. As principais diferenças entre as três técnicas estão na maneira como as variáveis de fluxo são aproximadas e no processo de discretização das equações. No CFX, a técnica empregada é a de volumes finitos.

Em linhas gerais, os métodos numéricos seguem os seguintes passos na resolução dos problemas: aproximação de variáveis desconhecidas do escoamento por uma média de funções simples; discretização por meio da substituição de aproximações em equações que governam o escoamento e subsequentes manipulações matemáticas; e solução das equações algébricas (Malalasekera e Versteeg, 1995).

4.2.1. Parâmetros de uma Simulação de Dispersão de Gases

A Tabela 1 apresenta, para uma simulação de dispersão de gases por CFD em uma unidade de processo, os principais parâmetros a serem considerados nas etapas de pré-processamento descritas acima.

Tabela 1: Principais parâmetros a serem considerados numa simulação de dispersão de gases por CFD.

Componentes	***Inputs* (parâmetros)**
Criação da geometria	Geometria em 3D (arranjo da unidade)
Geração da malha	Tipo e tamanho do elemento de malha
Pré-processamento - Domínio	Propriedade do fluido
	Modelo de turbulência
	Modelo de transferência de calor
	Modelo de empuxo
Pré-processamento - Atmosfera	Composição do fluido
	Direção e velocidade de vento
	Perfil de temperatura
	Perfil de turbulência
Pré-processamento – Gás vazado	Composição do fluido
	Vazão mássica e/ou velocidade do vazamento
	Temperatura e/ou pressão no vazamento
	Perfil de turbulência

4.3. Modelos Matemáticos

4.3.1. Conservação da Massa (Equação da Continuidade)

A equação da conservação de massa, também conhecida como equação da continuidade, é desenvolvida fazendo-se um balanço de massa sobre um elemento fixo interno ao volume de controle diferencial por onde escoa o fluido.

$$\begin{Bmatrix} \textbf{Taxa de} \\ \textbf{acumulo} \\ \textbf{de massa} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \textbf{Taxa de} \\ \textbf{entrada} \\ \textbf{de massa} \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} \textbf{Taxa} \\ \textbf{de saída} \\ \textbf{de massa} \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} \textbf{massa} \\ \textbf{gerada} \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} \textbf{massa} \\ \textbf{consumida} \end{Bmatrix}$$

Como para este problema se considera que não ocorrem geração ou consumo de massa, o balanço fica apenas com o termo de acúmulo e os termos convectivos:

$$\begin{Bmatrix} \textbf{Taxa de} \\ \textbf{acumulo} \\ \textbf{de massa} \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} \textbf{Taxa} \\ \textbf{de saída} \\ \textbf{de massa} \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} \textbf{Taxa de} \\ \textbf{entrada} \\ \textbf{de massa} \end{Bmatrix}$$

o que nos permite escrever a equação da conservação de massa em coordenadas cartesianas com as derivadas parciais (Equação 4.1) e em notação vetorial (Equação 4.2) da seguinte forma:

$$-\frac{\partial(\rho)}{\partial t} = \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} \tag{4.1}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \rho \boldsymbol{v} = 0 \tag{4.2}$$

Para fluidos incompressíveis, a Equação 4.2 assume a forma:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{v} = 0 \tag{4.3}$$

4.3.2. Conservação da Quantidade de Movimento (Equação do Movimento)

A equação da conservação da quantidade de movimento, também conhecida como equação do movimento, é obtida através do somatório das forças que atuam em um elemento de volume do volume de controle.

$$\boldsymbol{F_i} = \boldsymbol{F_p} + \boldsymbol{F_v} + \boldsymbol{F_g} \tag{4.4}$$

Onde:

$\boldsymbol{F_i}$= forças de inércia por unidade de volume;

$\boldsymbol{F_p}$=forças de pressão por unidade de volume;

$\boldsymbol{F_v}$=forças viscosas por unidade de volume e

$\boldsymbol{F_g}$=forças de campo por unidade de volume.

Essas forças assumem as seguintes formas:

$$\boldsymbol{F_i} = \frac{D\rho\boldsymbol{v}}{Dt} \tag{4.5}$$

$$\boldsymbol{F_p} = -\boldsymbol{\nabla}\mathrm{P} \tag{4.6}$$

$$\boldsymbol{F_v} = -\boldsymbol{\nabla}.\boldsymbol{\tau} \tag{4.7}$$

$$\boldsymbol{F_g} = \rho\boldsymbol{g} \tag{4.8}$$

Onde:

D/Dt = derivada substantiva;

$\boldsymbol{\tau}$= tensor tensão;

ρ= densidade do fluido;

$\boldsymbol{v}$= vetor velocidade;

P= pressão;

$\boldsymbol{g}$=aceleração da gravidade.

A substituição das Equações 4.5, 4.6, 4.7 e 4.8 na Equação 4.4 fornece:

$$\frac{D\rho \boldsymbol{v}}{Dt} = -\boldsymbol{\nabla}\mathrm{P} - \boldsymbol{\nabla}.\boldsymbol{\tau} + \rho \boldsymbol{g} \tag{4.9}$$

Simplificando-se a Equação 4.9 para fluido newtoniano incompressível e com viscosidade constante obtém-se a equação de Navier-Stokes (Equação 4.10):

$$\boldsymbol{\rho}\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = -\boldsymbol{\nabla}\mathrm{P} + \mu\nabla^2\boldsymbol{v} + \rho \boldsymbol{g} \tag{4.10}$$

4.3.3. Turbulência

Segundo Tennekes e Lumley (1972), a maioria dos escoamentos encontrados na natureza e em aplicações práticas de engenharia são turbulentos, apresentando instabilidades e possuindo flutuações que são dependentes do tempo e da posição no espaço, envolvendo transferências convectivas de momento, massa e energia.

Os escoamentos turbulentos apresentam as seguintes características (Santos, 2007 apud Fleck, 2008):

- Irregularidade: o escoamento é irregular, randômico e caótico. Não são moléculas de fluido que se deslocam aleatoriamente na direção do escoamento e ortogonal a ela, mas sim macromoléculas, chamadas de turbilhões. O tamanho do turbilhão determina a escala de turbulência;
- Difusividade: em escoamentos turbulentos a difusividade aumenta, significando maior transferência das propriedades de transporte (momento, calor e massa);
- Altos números de Reynolds;
- Tridimensional e transiente;
- Dissipativo: a energia cinética dos menores turbilhões é transformada em energia interna (calor), aquecendo o fluido em escoamento pela ação das tensões viscosas. Os menores turbilhões recebem energia de turbilhões ligeiramente superiores, que recebem energia de turbilhões um pouco maiores, e assim sucessivamente, até se chegar aos maiores turbilhões que extraem sua energia do escoamento médio (Teoria de Kolmogorov).
- Contínuo: a continuidade é mantida, uma vez que as menores escalas de turbilhões ainda são maiores que o livre caminho médio das moléculas.

A turbulência ocorre quando as forças de inércia no fluido se tornam mais importantes que as forças viscosas, sendo caracterizada pelos altos números de Reynolds encontrados nos escoamentos. Todos os três componentes da velocidade flutuam nas três direções espaciais e no tempo. Embora as derivadas destes componentes sejam finitas, a faixa de comprimentos de onda, assim como a de frequências, é contínua e muito larga, de um limite superior aproximadamente igual à largura da região turbulenta (maior turbilhão) até um limite inferior (menor turbilhão) imposto pelo amortecimento viscoso.

Desta forma, apesar das equações da continuidade e do movimento descreverem bem os escoamentos turbulentos sem a necessidade de informações adicionais, esta larga faixa de comprimento de onda e de frequência implica que as soluções numéricas das equações de Navier-Stokes requerem números muito grandes de pontos de discretização (em ordem de 10 milhões para escoamentos muitos simples) para que o domínio computacional inclua certo número de maiores turbilhões e que o menor turbilhão seja discretizado por um certo número de pontos (Su, 2009).

Segundo Su (2009), uma alternativa à solução direta das equações não estacionárias de Navier-Stokes é a modelagem da média (temporal) de Reynolds, na qual é tomada uma média estatística apropriada das equações de Navier-Stokes. Com o uso da média temporal o escoamento turbulento pode ser considerado estacionário.

Ao se medir a velocidade de um fluido que escoa no regime turbulento em um dado ponto e em função do tempo, obtém-se uma oscilação caótica na medida, conforme apresentado na Figura 7.

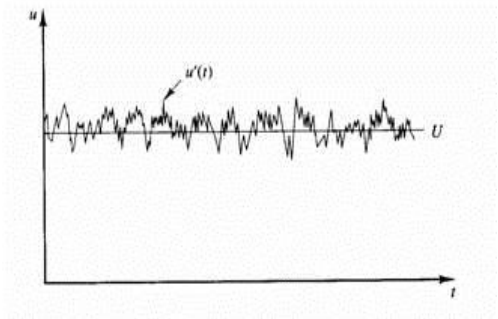


Figura 7: Velocidade instantânea *u*, velocidade média *U* e flutuação *u'* (Bird *et al.*, 2004).

Em problemas que envolvem a presença da turbulência, uma variável tem a sua medida instantânea, num tempo *t* qualquer, composta pela soma de duas componentes. A primeira

representa a média temporal e a segunda representa a flutuação turbulenta, conforme apresentado na Equação 4.11, onde *M* é uma variável qualquer.

$$M(t) = \overline{M} + M' \tag{4.11}$$

Segundo Freire *et al*., 1998 (apud Alves, 2012), a utilização da média temporal funciona como um filtro que remove as flutuações. Esta consideração permite o uso de malhas bem menos refinadas e, consequentemente, menor custo computacional. Entretanto, com isso, termos extras de correlações dos componentes flutuantes da velocidade aparecem nas equações médias resultantes, representando taxas de transferência de quantidade de movimento (ou de energia, concentração, etc.) pela turbulência.

A aplicação da média temporal na equação de Navier-Stokes instantânea (Equação 4.12) gera a Equação 4.13, ambas escritas com notação indicial.

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(u_i u_j\right) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\frac{\mu}{\rho}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)\right], \tag{4.12}$$

$$\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{u_i}\,\overline{u_j}\right) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\frac{\mu}{\rho}\left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i}\right) - \overline{u_i' u_j'}\right]. \tag{4.13}$$

A única diferença entre a equação do movimento instantânea (4.12) e a média temporal da equação do movimento (4.13) é o termo adicional surgido ($-\overline{\mathrm{u_i' u_j'}}$), conhecido como tensor de Reynolds, que representa a ação das flutuações de velocidade no escoamento médio. Devido a este termo, a resolução desta equação requer equações adicionais. Este problema é conhecido como o problema do fechamento da turbulência (Su, 2009), ou seja, obter equações suficientes para resolver todas as variáveis desconhecidas. Cabe aos usuários, no programa de CFD, a definição de um método para a determinação dos tensores de Reynolds que descreva adequadamente o maior número de situações dentro do escoamento desejado.

Para permitir que os efeitos da turbulência possam ser previstos, foram desenvolvidos os modelos de turbulência. Duas abordagens podem ser utilizadas para resolver os problemas da modelagem da turbulência (Fleck, 2008):

- Modelagem estatística clássica – simulação numérica do comportamento médio dos escoamentos turbulentos;
- Modelagem de sub-malha – simulação numérica de grandes escalas, onde as grandes estruturas são resolvidas explicitamente e as menores simplificadas por modelos.

Na modelagem estatística clássica, para descrever os tensores de Reynolds, dois tipos de modelos são os mais utilizados:

- Modelos baseados na viscosidade turbulenta: aqueles que utilizam a Hipótese de Boussinesq. Os mais comuns são os modelos algébricos (*Zero Equation*), modelos a 1 equação e modelos a 2 equações.
- Modelos dos Tensores de Reynolds (*Reynolds Stress Model* – RSM): estes modelos propõem a criação de uma equação de transporte direta para o tensor de Reynolds.

4.3.3.1. Modelos de Viscosidade Turbulenta

Segundo Boussinesq (1877), o conceito de viscosidade turbulenta relaciona a tensão turbulenta diretamente com a deformação do escoamento médio, de modo similar à relação entre a tensão cisalhante e o gradiente de velocidade de um escoamento Newtoniano (Lei de Newton da Viscosidade):

$$-\rho\overline{u_i' u_j'} = \mu_t \frac{\partial U}{\partial y} \tag{4.14}$$

É importante ressaltar que μ_t é uma propriedade do escoamento, fortemente dependente da posição e da intensidade de turbulência, diferenciando, portanto, de μ que é uma característica do fluido (viscosidade molecular).

Para o escoamento tridimensional, em geral:

$$-\rho\overline{u_i' u_j'} = \mu_t\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\delta_{ij}k \tag{4.15}$$

onde δ é o delta de Kroenecker (1, se i = j e 0, se i $\neq$ j), e k = ½ u^2 é a energia cinética.

Substituindo a Equação 4.15 na equação média de Navier-Stokes (4.13), o fechamento passa pela modelagem da viscosidade turbulenta.

4.3.3.1.1. Modelos a 2 Equações

Os modelos de turbulência baseados em duas equações de transporte serviram como base de muitas pesquisas e desenvolvimentos nas duas últimas décadas. São modelos que resolvem uma equação de transporte para a energia cinética turbulenta e outra, seja para o comprimento característico, seja para a dissipação da energia cinética turbulenta.

Nos modelos a uma ou a duas equações busca-se o cálculo de uma grandeza característica da turbulência para o cálculo da viscosidade turbulenta. Prandtl escolheu a energia cinética de flutuação turbulenta, k, (por unidade de massa), como a base da escala de velocidade, como é mostrado na Equação 4.16.

$$k = \frac{1}{2}\overline{u_i' u_i'} = \frac{1}{2}\left(\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}\right) \tag{4.16}$$

O modelo *k-ε* e as suas variantes são um dos mais utilizados na solução de problemas de interesse industrial. Este modelo, na sua forma padrão, possui duas equações, uma para a energia cinética turbulenta, k, e outra para a dissipação da energia cinética turbulenta, ε. O problema de fechamento é resolvido relacionando o tensor de Reynolds com a energia cinética turbulenta através da Equação 4.17, criando posteriormente as equações de transporte para k e ε.

$$\tau_{ij} = \overline{u_i' u_j'} = 2k \tag{4.17}$$

As principais equações e relações deste modelo, na sua forma padrão, são mostradas a seguir, conforme apresentado por Wilcox, 1994 (apud Alves, 2012).

Viscosidade turbulenta

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{4.18}$$

Energia cinética turbulenta

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{u}_j k\right) = \frac{\tau_{ii}}{\rho}\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} - \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_j}\right] \tag{4.19}$$

Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \overline{u}_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = C_{\varepsilon 1}\frac{\varepsilon}{k}\frac{\tau_{ii}}{\rho}\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2}\frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right] \tag{4.20}$$

Constantes de fechamento

$$C_{\varepsilon 1} = 1{,}44;\ C_{\varepsilon 2} = 1{,}92;\ C_\mu = 0{,}09;\ \sigma_k = 1{,}1;\ \sigma_\varepsilon = 1{,}3; \tag{4.21}$$

Relações auxiliares

$$\omega = \frac{\varepsilon}{C_\mu k} \quad \text{e} \quad l = C_\mu \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \tag{4.22}$$

O modelo RNG *k-ε* foi desenvolvido utilizando os Grupos de Renormalização (RNG) para renormalizar a equação de Navier-Stokes, computando os efeitos da menor escala do movimento. No modelo *k-ε* padrão a viscosidade turbulenta é determinada a partir de uma única escala de comprimento de turbulência, tendo como conseqüência a difusão turbulenta sendo calculada apenas na escala especificada, enquanto que, na realidade, todas as escalas de movimento contribuem para a difusão turbulenta. A abordagem RNG, que é uma técnica matemática que pode ser usada para gerar um modelo de turbulência semelhante ao *k-ε*, resulta em uma forma modificada que tenta explicar as diferentes escalas de movimento através de alterações em um dos termos da Equação 4.19. Sendo assim, o modelo proposto tem a mesma formulação do modelo *k-ε* clássico, exceto pelo cálculo da constante $C_{\varepsilon 2}$, que

aparece na Equação 4.20, e que deixa de ser uma constante e passa ser uma função da taxa de deformação média.

Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \overline{u_j}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = C_{\varepsilon 1}\frac{\varepsilon}{k}\frac{\tau_{ii}}{\rho}\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - C^*_{\varepsilon 2}\frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right] \tag{4.23}$$

Constantes de fechamento

$$C_{\varepsilon 1} = 1{,}42\ (1{,}44);\ C_{\varepsilon 2} = 1{,}68(1{,}92);\ C_\mu = 0{,}085\ (0{,}09);\ \sigma_k = 0{,}72(1{,}1);$$
$$\beta = 0{,}012;\ \lambda_0 = 4{,}38;\ \sigma_\varepsilon = 0{,}72\ (1{,}3); \tag{4.24}$$

Relações complementares

$$C^*_{\varepsilon 2} = C_{\varepsilon 2} + \frac{C_\mu \lambda^3 (1 - \lambda/\lambda_0)}{1 + \beta\lambda^3} \quad e \quad \lambda = \frac{k}{\varepsilon}\sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \tag{4.25}$$

4.3.3.2. Modelos dos Tensores de Reynolds

De forma geral, os modelos de turbulência baseados no conceito de viscosidade turbulenta representam uma solução consolidada para o problema do fechamento das equações médias de Navier-Stokes. No entanto, apesar do reconhecido desempenho na solução de diversas categorias de escoamentos turbulentos, tais modelos apresentam algumas deficiências, geralmente associadas às limitações impostas pela hipótese de Boussinesq. Escoamentos nos quais o comportamento anisotrópico (propriedades físicas variam com a direção) da turbulência mostra-se relevante, por exemplo, em escoamentos com forte curvatura, escoamentos helicoidais, e com altas rotações, representam um exemplo típico em que a hipótese de Boussinesq é falha.

Assim, os modelos de tensões de Reynolds não usam o conceito de viscosidade turbulenta de Boussinesq. Equações de transporte para as tensões turbulentas são modeladas diretamente, junto com uma equação de transporte para a escala de comprimento da turbulência. Em princípio, os modelos diferenciais de tensões de Reynolds

devem superar os modelos lineares de viscosidade turbulenta em todos os aspectos por levarem em conta os efeitos de não equilíbrio local, de história e principalmente de anistropia de turbulência. Entretanto, a desvantagem dos modelos diferencais de tensões de Reynolds é o alto custo de computação e a dificuldade de implantação numérica.

Este modelo se baseia em equações de transporte para definir todos os componententes do tensor de Reynolds e para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta ε, o que resulta em sete equações de transporte para o fechamento, uma vez que o tensor tensão turbulento é simétrico, $\tau_{ij} = \tau_{ji}$.

4.3.4. Transferência de Calor

Um modelo de transferência de calor deve ser utilizado para prever a temperatura ao longo do escoamento. A transferência de calor por condução, convecção, radiação e dissipação viscosa estão incluídas no pacote computacional, e a seguir são apresentadas algumas das opções disponíveis no CFX-Pre (ANSYS 13.0 Help, 2011):

- *None* (nenhum): Esta opção deve ser selecionada quando a simulação não envolve a modelagem da transferência de calor, ou seja, esta opção elimina o cálculo da transferência de calor pelas equações que a regem, reduzindo o número de cálculos realizados e, consequentemente, o tempo de simulação do CFX-Solver;
- Isotérmico: Este modelo requer a entrada de uma temperatura uniforme para o fluido, podendo ser usado para o propósito de avaliar as propriedades dos fluidos que são dependentes da temperatura, como a densidade de uma gás ideal. Também pode ser usado para a obtenção de resultados iniciais para o uso em modelos mais complexos. Mais uma vez, a transferência de calor não é calculada;
- *Thermal Energy*: Modela o transporte da entalpia ao longo do domínio do fluido. Este difere do *Total Energy*, que será visto em seguida, na medida que a energia cinética do fluido não é considerada. Consequentemente, este modelo reproduz os mesmos resultados que o modelo *Total Energy* quando os efeitos da energia cinética não existirem, sendo, portanto, adequado para escoamentos a baixas velocidades, onde a energia cinética é insignificante;
- *Total Energy*: Modela o transporte da entalpia e inclui o efeito da energia cinética. Este modelo deve ser usado, por exemplo, em escoamentos gasosos onde o número de Mach é

maior do que 0,3, sendo capaz de prever a compressibilidade dos gases em escoamentos subsônicos, sônicos e supersônicos.

4.4. Malha

A discretização do espaço físico se refere à aproximação de um problema em um domínio contínuo por elementos discretos, construindo-se a chamada malha computacional (Silva, 2008).

É necessário dividir o domínio em pequenos elementos, uma vez que a grande maioria dos métodos numéricos de solução de equações de transporte envolve cálculo no nível de subdomínios. Este processo de subdivisão é chamada de geração da malha (*grid* ou *mesh*).

Durante o processo de cálculo numérico, os resultados calculados nos pequenos subdomínios são transmitidos aos seus vizinhos. Desta forma, é preciso ter em mente que em regiões contendo grandes gradientes das variáveis é necessário um maior refinamento da malha, ou haverá perda na informação prejudicando a solução numérica.

A distribuição adequada dos pontos no domínio é fundamental para se obter uma solução numérica representativa do escoamento (HSL, 2003). Quanto maior for o número de pontos discretos, mais fina será a malha e, consequentemente, mais fiel ao modelo será o resultado numérico obtido. Paralelamente, estar-se-á aumentando o esforço computacional e, com isso, as simulações serão mais demoradas.

Para avaliar se a malha empregada em dado estudo está subdimensionada ou superdimensionada, é necessário realizar-se um teste de independência de malha. Este teste consiste na redução (refinamento) gradual do tamanho da malha até que as variáveis de interesse (velocidade, concentração, temperatura, pressão, etc.) não mais se alterem com o número de elementos.

As malhas podem ser estruturadas, não-estruturadas e híbridas.

As malhas estruturadas apresentam uma regularidade na distribuição espacial de seus pontos. Desconsiderando o contorno, malhas desse tipo possuem sempre o mesmo número de vizinhos. São compostas por elementos quadriláteros e/ou triangulares, em geometrias 2D, e elementos hexaédricos (Figura 8), tetraédricos e/ou prismáticos, em geometrias 3D. Elas podem, ainda, ser uniformes, quando seus pontos estão igualmente espaçados, ou não

uniformes, quando seus pontos são espaçados de acordo com a necessidade do domínio (Fleck, 2008).

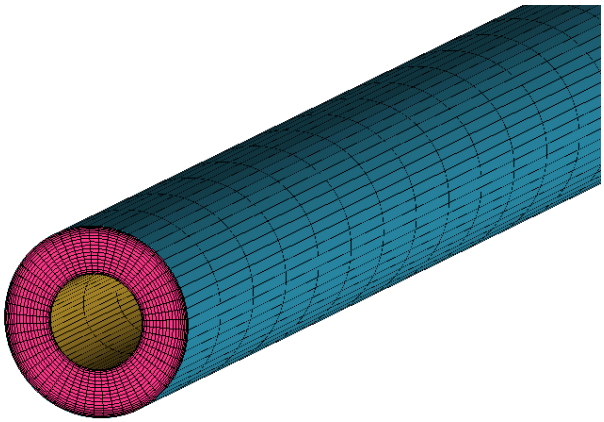


Figura 8: Malha estruturada com elementos hexaédricos (Alves, 2012).

As células que fazem parte de uma malha não-estruturada não contêm o mesmo número de vizinhos, além disso, são caracterizadas pela ausência de regularidade na distribuição espacial dos pontos. As células podem assumir diferentes formatos como triângulos, tetraedros, prismas, hexaedros, etc. A geração de malhas desse tipo é bem vantajosa para a discretização de geometrias complexas, como unidades de processos em refinarias, devido à sua fácil adaptação à geometria.

Na Figura 9, é apresentada uma malha não estruturada confeccionada com elementos tetraédricos.

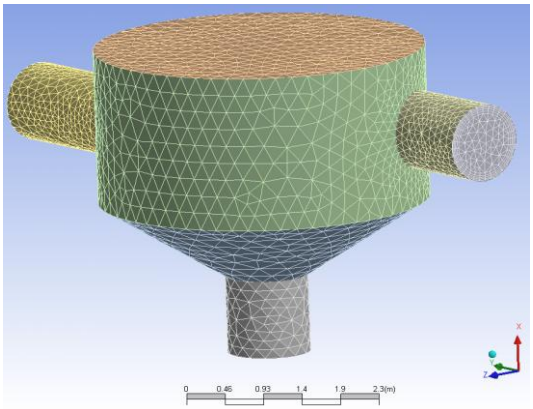


Figura 9: Malha não-estruturada com elementos tetraédricos (Alves, 2012).

Para alguns problemas, pode-se necessitar de malhas mistas (híbridas), contendo os dois tipos de malhas mencionadas anteriormente. Para melhor captação do perfil de

velocidade próximo à parede, optou-se por uma malha hexaédrica nesta região, e o restante do domínio foi formado por elementos tetraédricos (Figura 10).

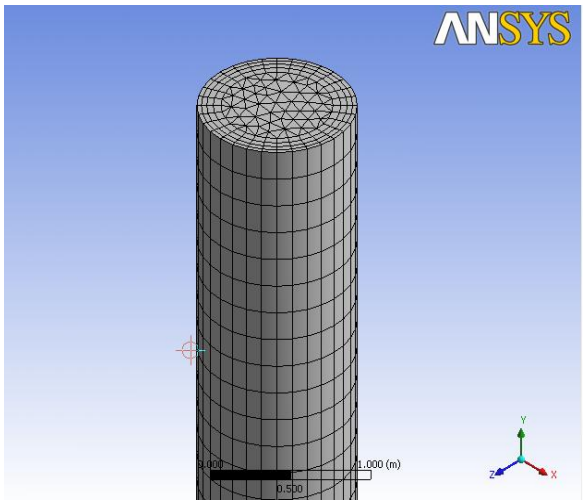


Figura 10: Malha híbrida contendo elementos hexaédricos próximos à parede e tetraédricos na região central (Alves, 2012).

4.4.1. Qualidade da Malha

Uma boa malha apresenta 3 características: uma boa resolução, uma distribuição apropriada dos elementos e uma boa qualidade dos elementos. As duas primeiras dependem, de uma maneira geral, do processo de refino da malha, isto é: o método da malha (híbrida, estruturada, não estruturada), do uso das funções de tamanho, do refinamento local, etc. e das estratégias de refino usadas pelo usuário para a condução de uma determinada análise. Por outro lado, o programa ANSYS Meshing pode quantificar, através de algumas métricas, a qualidade da malha (dos elementos) (ANSYS 13.0 Help, 2011).

Existem vários parâmetros que podem definir a qualidade de uma malha, entre eles a assimetria (*skewness*) e a qualidade ortogonal (*orthogonal quality*).

O *skewness* determina o desvio da face ou célula real para a face ou célula ótima (aquela que possui o mesmo ângulo entre seus vértices: 60° para triângulo e tetraedro e 90° para quadrilátero e hexaedro). Existem 2 métodos para a determinação deste parâmetro: desvio do volume equilátero, aplicado apenas a triângulos e tetraedros; e desvio do ângulo normalizado, aplicado a todas as células. Quanto mais próximo de zero, significa menor desvio entre a célula ou face real e a ótima, caracterizando uma melhor qualidade da malha.

O *orthogonal quality* relaciona, na face, o vetor normal à face (A_i) e o vetor do centro da face ao centro da aresta (e_i). Na célula, relaciona o vetor normal à face e o vetor do centróide da célula para o centro daquela face (f_i), ou o vetor normal à face e o vetor do centro da célula para o centro da célula adjacente (c_i) (Figura 11). Quanto mais alinhados estiverem os vetores desta relação, mais próximo a 1 (um) será o valor do parâmetro e melhor será a qualidade da malha.

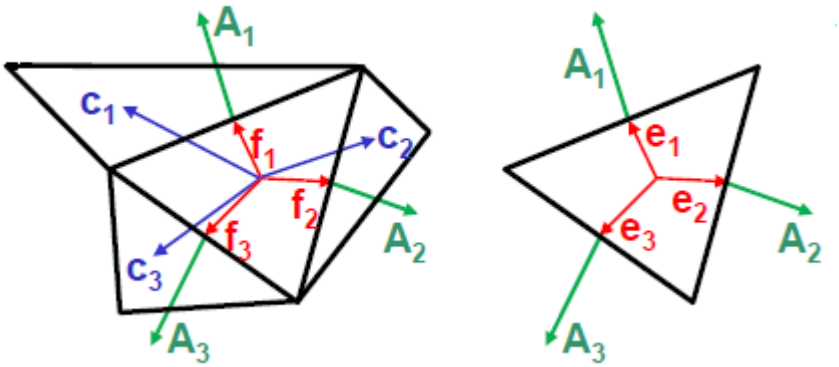


Figura 11: Vetores das relações para determinação do *ortogonal quality*: (a) célula, (b) face (ANSYS 13.0 Help, 2011).

Na Tabela 2 e Tabela 3 são apresentadas, respectivamente, as faixas que indicam o grau de qualidade da malha para o *skewness* e o *orthogonal quality*.

Tabela 2: Faixas de qualidade de malha para os parâmetros *skewness* (ANSYS 13.0 Help, 2011).

SKEWNESS					
Excelente	Muito bom	Bom	Aceitável	Ruim	Inaceitável
0 – 0.25	0.25 – 0.50	0.50 – 0.80	0.80 – 0.94	0.95 – 0.97	0.98 – 1.00

Tabela 3: Faixas de qualidade de malha para os parâmetros *orthogonal quality* (ANSYS 13.0 Help, 2011).

ORTHOGONAL QUALITY					
Excelente	Muito bom	Bom	Aceitável	Ruim	Inaceitável
0.95 – 1.00	0.70 – 0.95	0.20 – 0.69	0.10 – 0.20	0.001 – 0.10	0 – 0.001

5. MATERIAIS E MÉTODOS

5.1. Programas e Poder Computacional

Os testes foram realizados através de simulações numéricas empregando o programa de CFD ANSYS CFX 12.1 e 13.0. O equipamento utilizado para os cálculos numéricos foi um cluster da empresa SGI, constituído de 20 nós duplos contendo 40 processadores Intel Xeon quad-core com 2.33 GHz, 8 GB de memória RAM e 250 GB de memória física. Este equipamento contém ainda um head node com 2 processadores Intel Xeon quad-core de 2,33 GHz, 8 GB de memória RAM, e 146 SAS HD. Com isso, tem-se um total de 168 cores e 168 GB de memória RAM. Este equipamento conta com um storage de 8 TB de memória física, que tem a função de armazenar as simulações realizadas e fazer cópia de segurança dos principais arquivos do sistema.

Durante as simulações foram utilizados 8 processadores, tendo as mesmas levado cerca de 2 horas, para as simulações mais simples, a 30 horas, para as mais complexas, que correspondem à dispersão na unidade de HDT.

5.2. Testes Modelo

Vimos que HSL (2003) sugere, uma vez que os pacotes mais modernos de CFD conseguem modelar escoamentos sônicos sem qualquer perda de eficiência, que, somente quando o número de Mach for inferior a 0,3 em todo o domínio, o escoamento deveria ser simulado como subsônico/incompressível. No entanto, a maioria absoluta dos estudos de dispersão de gases que se encontra na literatura, mesmo nos casos de vazamentos a altas pressões, considera, para efeito de simplificação da simulação numérica, escoamentos subsônicos.

Fleck (2008) usou do artifício do tronco de cone, já citado neste trabalho, para evitar o uso de modelos sônicos, tratando suas simulações como sendo subsônicas e incompressíveis.

Desta forma, tendo como pano de fundo o histórico acima relatado, verificou-se ser importante, primeiramente, a realização de 'Testes Modelo' com o objetivo de comparar os resultados obtidos em simulações de dispersões de gases a altas pressões, maioria dos casos

em unidades de processo, com o uso de diferentes modelagens, e desta forma tentar definir qual a que melhor representa um escoamento sônico de gás.

Para isso, vários casos foram simulados, alterando-se, principalmente, o tipo de escoamento: sônico ou subsônico; e as características dos gases: compressível ou incompressível.

Os casos simulados nos Testes Modelo são apresentados na Tabela 4.

Tabela 4: Testes Modelo – Casos simulados.

	Caso 1	**Caso 2**	**Caso 3**	**Caso 4**	**Caso 5**	**Caso 6**
Escoamento	Subsônico	Subsônico	Subsônico	Sônico	Sônico	Subsônico
Característica dos gases	Incom-pressível	Incom-pressível	Incom-pressível	Com-pressível	Com-pressível	Incom-pressível
Inlet	Furo	Furo	*Source point*	*Source point*	Furo	Furo (tronco de cone)
Parâmetro no *inlet*	Vazão	Velocidade	Vazão e velocidade	Vazão e velocidade	Pressão e velocidade	Vazão

5.2.1. Geometria e Malha

As definições da geometria e de sua malha estão associadas às condições de contorno do problema, aos recursos computacionais disponíveis e influenciam diretamente na veracidade da solução numérica.

A qualidade da representação geométrica tem um efeito significativo nos resultados das simulações. Embora isso possa ser mais crítico em simulações de explosões, também é importante em simulações de vazamentos e dispersão (Strϕm e Bakke, 1999). De acordo com o arranjo de unidades de processo convencionais, se ele for fielmente representado, podem ser geradas, por exemplo, zonas turbulentas, zonas de maior circulação de ar, zonas geradoras de vórtices, tudo isso contribuindo e influenciando no perfil da nuvem de gás que será formada, bem como na sua concentração. Fica fácil perceber, portanto, a importância do modelo geométrico.

A geometria criada para a realização dos testes consiste em um cilindro, cujas dimensões são apresentadas na Tabela 5, e foi criada pelo programa Design Modeler da

ANSYS. A liberação de gás ocorre na base do cilindro, na coordenada 0, 0, 0. A Figura 12 apresenta a geometria idealizada para a realização dos testes.

Tabela 5: Testes Modelo – Dimensões do cilindro.

	Dimensão
Diâmetro	10 m
Altura (eixo Z)	8 m
Diâmetro do orifício de liberação de gás	10 mm
Diâmetro do orifício de liberação de gás (tronco de cone)	55 mm

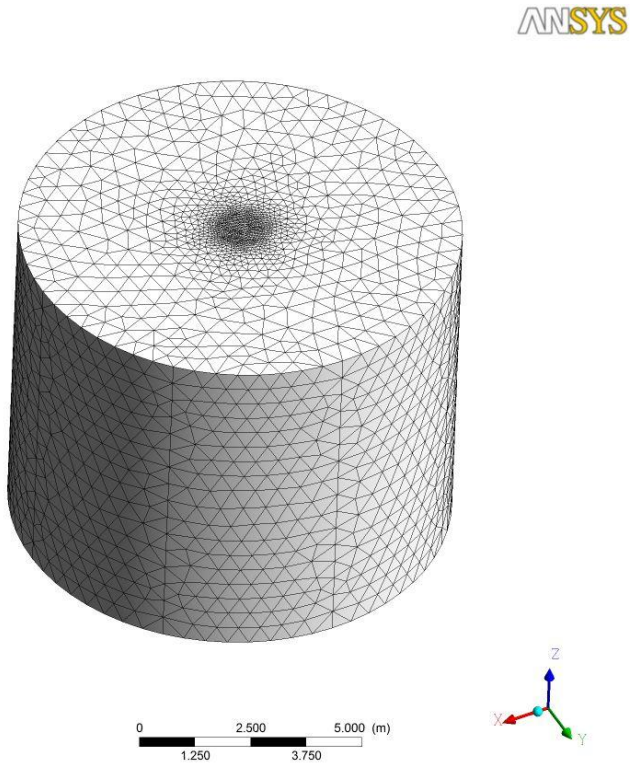


Figura 12: Geometria idealizada para realização dos Testes Modelo.

A malha deve ser construída de forma que ela resolva adequadamente o vazamento de gás e a sua dispersão (HSL, 2003). Quanto maior o número de nós numa malha, mais precisos tendem a ser os resultados numa simulação. No entanto, isso tem o preço do aumento de tempo computacional para a convergência da simulação e também dos recursos de *hardware*, que terão de ser mais robustos. Para contornar este problema, uma malha suficientemente refinada deve ser feita nos pontos de vazamento e nas regiões onde é

esperada a expansão do gás. Isto assegura que os altos gradientes das variáveis de fluxo serão resolvidos (Malalasekera e Versteeg, 1995 e HSL, 2003).

A confecção da malha foi realizada através do programa ANSYS Meshing da ANSYS, e para garantir que os resultados obtidos sofressem a mínima influência da mesma, simulações com diferentes tamanhos de malha foram realizadas até que se obtivessem resultados que não apresentavam grandes alterações conforme o incremento da mesma. Assim, a malha tetraédrica usada nos testes contém 145.787 nós e 857.500 elementos.

A Figura 13 apresenta um corte no plano XY, em Z = 0, para que seja observada a malha criada para o cilindro, e a Figura 14 um detalhe no ponto de vazamento, mostrando o refinamento nesta região.

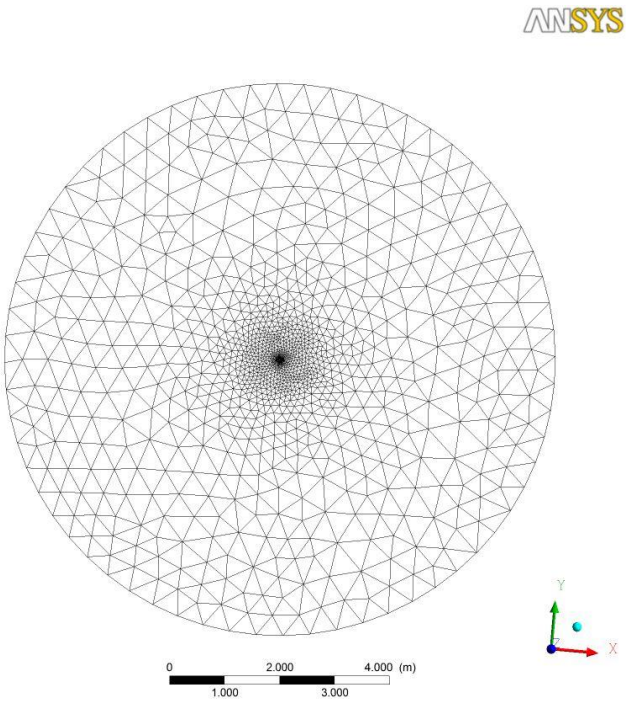


Figura 13: Malha tetraédrica – Corte XY.

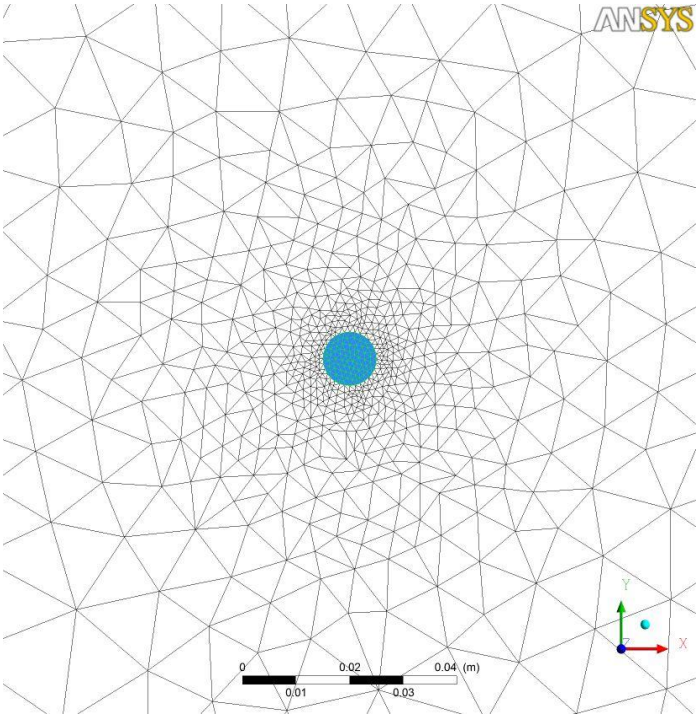


Figura 14: Detalhe do refinamento no ponto de vazamento.

Ainda com o objetivo de minimizar a influência da malha nos resultados, além do refinamento no ponto de vazamento, também foi dada especial atenção à região de escoamento do gás (Figura 15.a). A Figura 15.b apresenta a malha refinada já com a dispersão do gás, mostrando que a região refinada aparentemente está adequada, uma vez que a dispersão está contida na mesma.

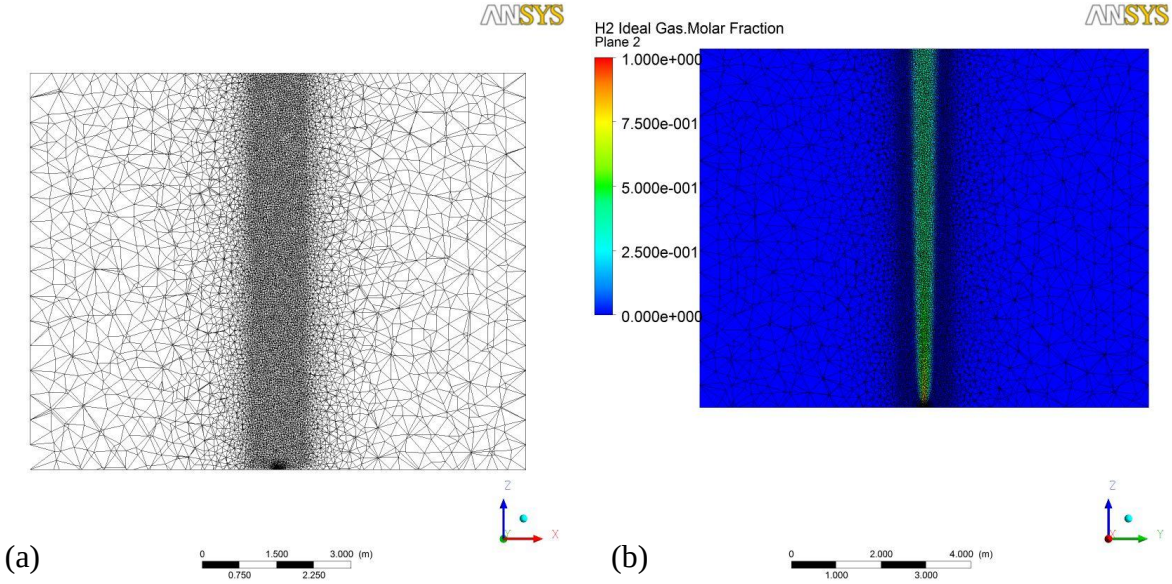


Figura 15: Refinamento da malha: (a) ao longo do eixo Z, (b) escoamento de gás dentro da área refinada.

5.2.2. Entrada de Gás: Furo, *Source Point* e Tronco de Cone

Para representar a entrada (*inlet*) do gás inflamável no domínio, deve-se, ainda na fase de elaboração da geometria, definir uma região 2D que posteriormente, na etapa de definição dos *settings* da simulação no CFX-Pre, representará o furo pelo qual o gás será liberado. Outra maneira seria, diretamente no CFX-Pre, ou seja, sem qualquer interferência na geometria, usar uma fonte de quantidade chamada *source point*, na coordenada onde estaria localizada esta região, isto é, no exato local da liberação gasosa.

O *source point* pode ser especialmente interessante em situações onde existam muitos pontos de vazamento, como é o caso de plataformas de petróleo e de unidades de processo, pois reduziria significativamente o tempo gasto na etapa de construção da geometria. Sem levar em conta que, se por qualquer motivo algum ponto de vazamento tenha deixado de ser considerado na geometria inicial, seria necessário voltar à etapa da geometria, confeccionar este ponto, gerar novamente a malha, para somente depois preparar os *settings* da simulação, ao passo que com o uso do *source point* seria necessário, somente, refinar a região deste novo ponto, mas a geometria não sofreria qualquer alteração.

Para a modelagem de vazamentos de gás, HSL (2003) comenta que a entrada de gás (*inlet boundary*) deveria conter, para o caso em questão, pelo menos 10 células na face ou no caso de se usar *source point*, o tamanho da célula deveria ser aproximadamente o mesmo da largura do jato. Ainda segundo HSL (2003), as considerações acima são válidas para vazamentos em orifícios redondos. Vazamentos em flanges, por exemplo, se comportariam de maneira diferente, mas que ainda são poucas as pesquisas realizadas para indicar a melhor aproximação para modelar tais vazamentos, sendo o mais comum considerar orifícios redondos de mesma área.

Desta forma, nos casos simulados também foram feitos testes comparando os resultados quando o gás inflamável entra no domínio através do furo ou pelo *source point*, para verificar se o uso do *source point* é adequado.

Vimos na Seção 2.3 que a maioria dos vazamentos ocorre em orifícios com diâmetros de até 10 mm. Sendo assim, este foi o diâmetro adotado na geometria e também para efeito de cálculo da vazão mássica de gás vazado. A liberação do gás, tanto para o furo, quanto para o *source point*, ocorre na base do cilindro, na coordenada 0, 0, 0.

Para o caso do tronco de cone, o seu diâmetro é determinado utilizando-se as equações 2.5, ou seja, considerando a pressão no ponto do vazamento (P_{choked}), e 2.13. É importante ressaltar que como o comprimento do tronco de cone é muito pequeno, da ordem de poucos centímetros, e como não implica em mudanças nos perfis de escoamento do jato, como relatado por Fleck (2008), o mesmo não foi considerado. Desta forma, o que foi feito foi aumentar o diâmetro de 10 mm para 55 mm no próprio ponto de vazamento (0, 0, 0).

5.2.3. Características do Vazamento e Condições de Contorno

O gás vazado é hidrogênio (H_2) a 58,5 Kgf/cm^2 (5,74x10^6 Pa) e 93 °C. A razão para esta escolha reside no fato de ser este gás, nestas mesmas condições, que será escopo do estudo de dispersão na unidade de processo de HDT.

Na temperatura e pressão informadas, a densidade (ρ) e o coeficiente isentrópico (γ) do H_2 são, respectivamente, 3,789 Kg/m^3 e 1,418.

Nestas condições, P_0/P_a >> 1,9, ou seja, o escoamento é sônico, e $\psi = 1$.

O diâmetro de 10 mm (área = 7,85x10^{-5} m^2) para o orifício de vazamento é adotado a partir dos dados das estatísticas de vazamentos apresentados no Capítulo 2.

Considerando o coeficiente de descarga (C_d) igual a 0,65, e utilizando a Equação 2.1:

$$q_s = C_d \times A_h \times \psi \times \sqrt{\left(\rho_0 \times P_0 \times \gamma \times \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\left(\frac{\gamma+1}{\gamma-1} \right)} \right)} \quad (kg/s)$$

Obtém-se uma vazão mássica (q_s) de 0,1637 Kg/s.

Utilizando a Equação 2.11:

$$V_S = \sqrt{\gamma \frac{P_0}{\rho_0}}$$

Obtém-se uma velocidade de descarga do gás de aproximadamente 1460 m/s.

Para a simulação com tronco de cone, a vazão mássica deve ser a mesma calculada anteriormente, o que se altera é a área do orifício de vazamento. Como o diâmetro calculado para o tronco de cone é de 55 mm, a área será igual a $2{,}4 \times 10^{-4}$ m^2.

Temos ainda, pelas Equações 2.5 e 2.9, que a pressão crítica e a temperatura crítica para o escoamento sônico, ou seja, pressão e temperatura no ponto do vazamento, são, respectivamente, 30,1 Kgf/cm^2 e 77 °C.

As condições do ambiente estão a 25 °C e 1 atm e os testes foram conduzidos sem a influência do vento.

Durante a formulação do problema no CFX-Pre é necessário especificar como a simulação será tratada em relação ao regime do escoamento. Segundo HSL (2003), em geral, é suficiente realizar cálculos estacionários para analisar o tamanho das nuvens geradas, sendo que o escoamento transiente pode ser utilizado para determinação do tempo de detecção.

Além disso, é necessário especificar como o CFX-Solver irá tratar as faces do volume de controle durante as simulações. As regiões 2D da geometria podem ser definidas das seguintes formas: *inlet*, *outlet*, *opening* ou *wall* (*free slip* ou *no slip*, sem ou com aderência, respectivamente). Quando uma região 2D é tratada como *inlet*, significa que o fluido entrará no volume de controle. Para o caso de *outlet*, o fluido sairá do volume de controle, e no caso de *opening*, o fluido poderá entrar ou sair do volume de controle.

O *source point* atua num único elemento da malha e cria fontes de quantidades em um ponto específico dentro do domínio de interesse. A localização do ponto é definida em coordenadas cartesianas e a fonte é criada no elemento da malha que está mais próximo do ponto especificado. As fontes devem ser especificadas como quantidades volumétricas, como vazão mássica, ou seja, momento ou radiação não podem ser especificados sozinhos (Ansys 13.0 Help, 2011).

Para o cilindro devem ser estabelecidas regiões de contorno para 3 regiões: a entrada do gás foi especificada como *inlet* ou *source point*, e se localiza na origem (0, 0, 0). Para a lateral e o teto do cilindro usou-se a definição de *opening*, ou seja, o fluido pode entrar ou sair do domínio. Já a base do cilindro, em z=0, excetuando-se a região de liberação de gás, é considerada *wall* (*no slip*). Para os testes não foi considerada a influência do vento.

Na entrada de gás, como observado na Tabela 4, dependendo do caso, podem ser estabelecidas: a vazão mássica, a velocidade, e a pressão. Além disso, a concentração do gás também deve ser informada (neste caso 100% é H_2). Nas saídas foi utilizada a pressão na saída, pressão de referência no CFX-Pre. Para a parede é utilizada a condição de não deslizamento, o que significa que o fluido imediatamente junto da parede tem a mesma velocidade que ela, como nas simulações as paredes são estáticas, a velocidade do fluido na parede será nula.

Outro ponto é a condição de entrada turbulenta no domínio (*inlet turbulence conditions*). Na entrada de fluxo no domínio, condições de contorno para k, ε, ω e/ou $\overline{u_i}\overline{u_j}$ devem ser especificadas, dependendo do modelo de turbulência a ser selecionado. Existem várias opções para a especificação da quantidade turbulenta:

- Explicitamente entrar com valores para k, ε, ω ou $\overline{u_i}\overline{u_j}$;
- Informar a intensidade de turbulência (I) e a escala de comprimento (comprimento característico);
- Informar a intensidade de turbulência e a razão da viscosidade turbulenta (μ_t/μ).

A intensidade de turbulência é definida como a razão entre a raíz quadrada média das flutuações da velocidade turbulenta e a velocidade média. Se a energia cinética turbulenta, k, é conhecida, a raiz quadrada média das flutuações da velocidade turbulenta pode ser escrita como $\sqrt{\frac{2k}{3}}$.

$$I = \frac{1}{U}\sqrt{\frac{2k}{3}} \tag{5.1}$$

onde a velocidade média pode ser escrita como:

$$U = \sqrt{U_x^2 + U_y^2 + U_z^2} \tag{5.2}$$

A Tabela 6 apresenta as condições de contorno e os principais parâmetros da simulação, sendo que os perfis de vazão mássica do gás na entrada e pressão nas saídas são considerados constantes.

Tabela 6: Testes Modelo – Condições de contorno e parâmetros da simulação.

Condição de contorno / Parâmetro	**Valor**
Caso 1 - *inlet*	0,1637 Kg/s
Caso 2 - *inlet*	1460 m/s
Caso 3 – *source point*	0,1637 Kg/s e 1460 m/s
Caso 4 – *source point*	0,1637 Kg/s e 1460 m/s
Caso 5 - *inlet*	30,1 Kgf/cm^2 e 1460 m/s
Caso 6 - *inlet*	0,1637 Kg/s
Saídas de gás (*opening*)	P_{set} = 0 atm
Base do cilindro (*wall*)	*No slip*
Pressão de referência: Domínio	P = 1 atm
Regime de escoamento	Estacionário
Tipo de escoamento	Compressível*
Modelo de transferência de calor: Domínio	*Total Energy**
Modelo de turbulência: Domínio	RNG κ-ε
Modelo de turbulência: Entrada de gás	*High* (*Intensity* = 10%)
Condições iniciais no domínio	Ar = 100% vol e 25 °C

* Casos 4 e 5. Os demais casos foram simulados como incompressíveis e *Thermal Energy*.

5.3. Validação da Simulação Numérica

Para a validação dos resultados das simulações em CFD é necessário confrontar os resultados obtidos numericamente com resultados experimentais. Esta necessidade existe devido ao fato das simulações numéricas poderem apresentar falsos resultados, sendo que estes podem ser resultantes da má escolha dos modelos, do pouco refino de malha, de condições de contorno inadequadas, de modelo de turbulência inadequado, de natureza numérica, dentre outros (Alves, 2012).

Para garantir a utilização de uma modelagem adequada, antes de iniciar a dispersão de gases na unidade de processo, realizou-se uma etapa de validação. Sendo assim, buscou-se na literatura artigos que apresentassem dados experimentais de liberações de hidrogênio a altas pressões, caracterizando, assim, escoamento sônico, e em áreas abertas, como numa planta de processo.

O artigo selecionado foi o de Roberts *et al*. (2006), que tinham por objetivo determinar como as liberações de hidrogênio se diferenciavam daquelas associadas aos dos hidrocarbonetos tradicionais, e se os modelos existentes poderiam descrever adequadamente este comportamento.

Para isso foram realizados experimentos controlados com liberações de hidrogênio, numa área aberta, sem obstáculos, variando a pressão numa escala de 10 a 150 atmosferas,

em orifícios de diâmetro que variavam de 1 a 12 mm, a 1,5 m do chão. Na Figura 16 pode ser observado o ponto de liberação do gás e a posição dos detectores, localizados a partir de 3 m do ponto de liberação.

Figura 16: Ponto de liberação e localização dos detectores (Roberts *et al*., 2006).

A pressão e a temperatura do hidrogênio na tubulação, no orifício de liberação, foram medidas durante a realização de cada experimento, bem como a temperatura ambiente e a velocidade e a direção do vento na altura do ponto de liberação.

A concentração de gás da nuvem foi medida através de detectores posicionados entre 3 e 11 m do ponto de descarga de hidrogênio (Figura 17), na mesma altura da liberação do gás.

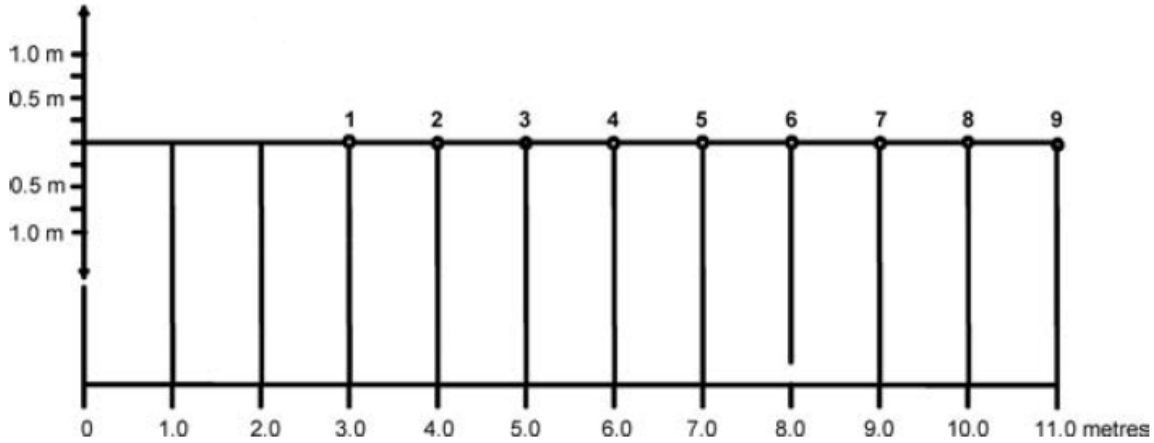


Figura 17: Distâncias dos detectores do ponto de vazamento (Roberts *et al*., 2006)

5.3.1. Geometria e Malha

A geometria construída para validação da modelagem é bastante simples, tal como o campo aberto utilizado pelos autores do artigo para realização dos experimentos, constituindo-se de uma área de 40 x 10 metros. Apesar dos detectores estarem localizados a, no máximo, 11 m do ponto de vazamento, optou-se por usar uma área maior para evitar que os limites da geometria interferissem nas simulações. Da mesma forma, apesar das liberações de gás ocorrerem a 1,5 m do chão, foi adotada, por margem de segurança, uma altura de 12 m.

Pelas características da geometria, optou-se por se fazer uma malha estruturada, composta por elementos hexaédricos. Para as simulações utilizando *source point*, a malha final contém 1.159.389 nós e 1.121.456 elementos, já para as simulações com o uso do tronco de cone, devido à necessidade de um maior refinamento no furo, a malha final (Figura 18) apresenta 1.260.456 nós e 1.223.791 elementos.

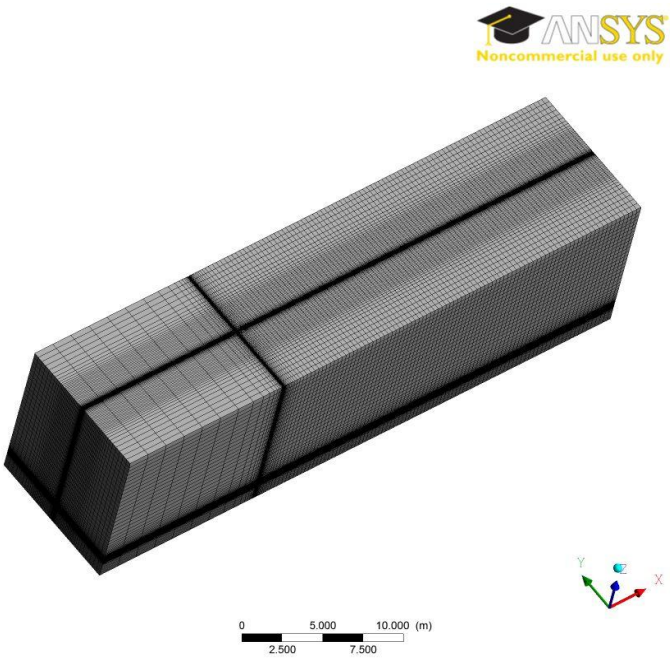


Figura 18: Malha hexaédrica desenvolvida para validação da simulação numérica.

A Figura 19 e a Figura 20 apresentam, respectivamente, o refinamento interno no domínio, corte ZX em y = 5 m, e o refinamento na região do furo.

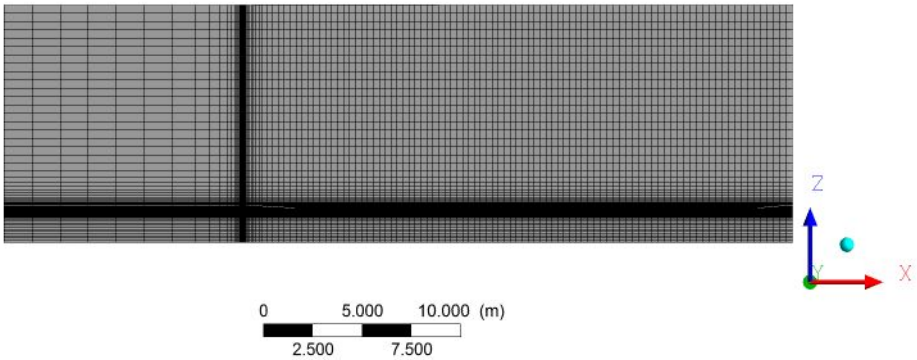


Figura 19: Refinamento interno da malha – Corte ZX.

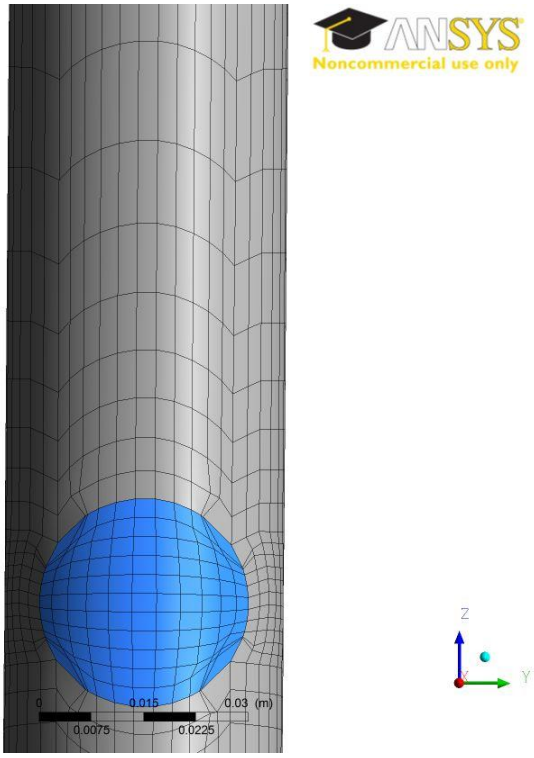


Figura 20: Refinamento no orifício de vazamento do gás inflamável.

5.3.2. Características do Vazamento e Condições de Contorno

Roberts *et al*. (2006) realizaram 23 experimentos, variando o tamanho dos orifícios e a pressão de liberação do gás. Para a validação da simulação numérica no presente trabalho foi escolhido o experimento de número 7, conduzido pelos autores, no artigo. Isto porque, neste experimento, a direção do vento, paralela à liberação do gás, foi praticamente constante durante toda a dispersão gasosa, bem como a sua velocidade, que também pouco

se alterou, sendo fruto de relato dos próprios autores, e que pode ser observado na figura 4 do referido artigo.

A liberação de hidrogênio ocorre a uma pressão de aproximadamente 100 Kgf/cm^2 (97 atm), na temperatura de 14 °C, através de um orifício de 3 mm de diâmetro, a uma vazão mássica, informada pelos autores, de 0,045 Kg/s. O vento possui a mesma direção e sentido da liberação, com velocidade de 1,1 m/s.

A densidade do H_2 na temperatura e pressão de liberação é em torno de 4,03 Kg/m^3. Considerando a Equação 2.11, a velocidade de escoamento do gás é de aproximadamente 1870 m/s.

A Tabela 7 apresenta as condições de contorno e os parâmetros mais importantes da simulação. A temperatura do ambiente não foi informada pelos autores, desta forma, foi assumido que o gás estava armazenado à mesma temperatura do ambiente, ou seja, 14 °C.

Novamente, tal como realizado para os Testes Modelo, para a determinação da área do tronco de cone utilizou-se Equação 2.13. Como o orifício original mede 3 mm, A_1 = 7,1x10^{-6} m^2. Considerando a pressão de liberação do gás igual a 100 Kgf/cm^2 e que a mesma ocorre para uma pressão atmosférica, tem-se que a área do tronco de cone é de 7,1x10^{-4} m^2, ou seja, o diâmetro do orifício mede 30 mm.

Além disso, diferentemente do Teste Modelo, onde no escoamento subsônico com tronco de cone foi fornecida a vazão mássica de H_2 como condição de contorno para entrada do gás, desta vez optou-se por fornecer a velocidade de escoamento do gás, como outra forma de avaliar as respostas fornecidas por esta aproximação.

A velocidade da *pseudo source* deve ser calculada através da Equação 2.14:

$$V_2 = V_C + \frac{P_c - P_2}{\rho_c \times V_C}$$

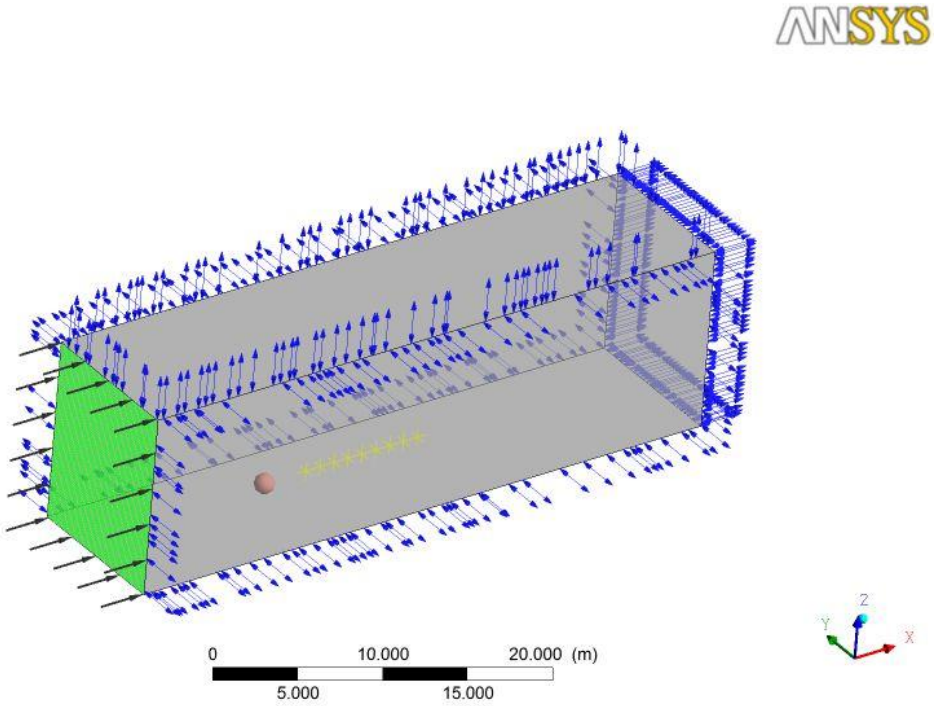
Desta forma, a velocidade de escoamento da *pseudo source* é de aproximadamente 3184 m/s.

Tabela 7: Validação da simulação numérica – Condições de contorno e parâmetros da simulação.

Condição de contorno / Parâmetro	Valor
***Source point* – escoamento sônico**	
Vazamento de gás (*inlet*)	0,045 Kg/s e 1870 m/s
Tronco de cone – escoamento subsônico	
Vazamento de gás (*inlet*)	3184 m/s
Entrada de vento (inlet)	1,1 m/s
Saídas de gás (*opening*)	P_{set} = 0 atm
Piso (*wall*)	*No slip*
Pressão de referência: Domínio	P = 1 atm
Regime de escoamento	Estacionário
Tipo de escoamento	Compressível*
Modelo de transferência de calor: Domínio	*Total Energy**
Modelo de turbulência: Domínio	κ-ε
Modelo de turbulência: Entrada de gás	*High* (*Intensity* = 10%)
Condições iniciais no domínio	Ar = 100% vol e 14 °C

* Somente para o escoamento sônico com *source point*. O escoamento subsôncico com tronco de cone foi simulado como incompressível e isotérmico.

A Figura 21 (a) apresenta em destaque a região 2D que corresponde à entrada (*inlet*) do vento no domínio e a (b) as regiões, também em destaque, correspondentes à entrada ou saída dos gases no domínio, já que foram consideradas como *opening*. O piso foi considerado como *wall*, com condição de *no slip*.



(a)

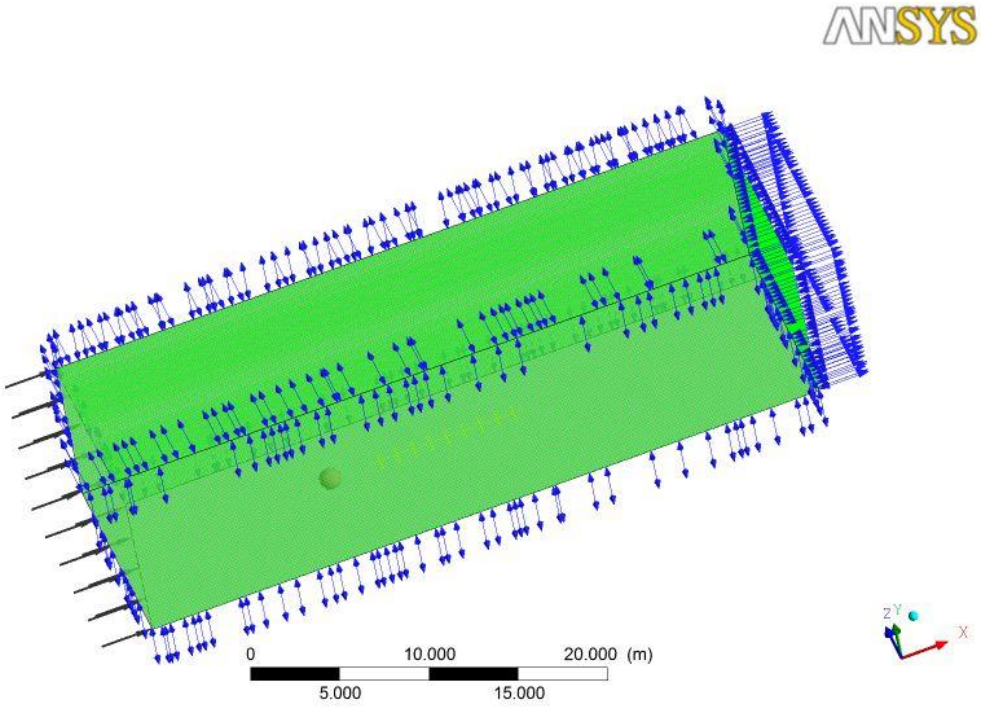


Figura 21: Regiões 2D da simulação: 21.a: *inlet* do vento; 21.b: regiões de *opening* (entrada ou saída dos gases).

Apesar de nos Testes Modelo ter sido usado o modelo de turbulência RNG κ-ε, para a validação da simulação numérica usou-se apenas o modelo κ-ε, sem os grupos de renormalização (RNG). Esta escolha deveu-se ao fato de vários outros autores já terem adotado este mesmo modelo em seus estudos de dispersão gasosa. HSL (2003) o utilizou para simulações de dispersão em turbinas a gás. HSL (1997) afirma que apesar deste modelo apresentar algumas desvantagens, ele é o mais utilizado e com maior número de resultados documentados para este tipo de estudo.

Modelos de turbulência foram estudados na dispersão de gases pesados sobre obstáculos, experimental e numericamente, com o auxílio de CFD. Foi mostrado que, em geral, os resultados obtidos através da simulação numérica foram bons e coerentes, quando comparados aos resultados experimentais. E concluíram, assim como HSL (2003), que os modelos κ-ε e SST forneceram os melhores resultados (Rigas *et al*., 2004 apud Fleck, 2008).

Além disso, este modelo também tem sido utilizado para simulações de dispersão de gás natural liquefeito (GNL) e também para dispersão de outros gases densos com resultados satisfatórios (Ruifeng *et al*., 2010).

5.4. Estudo de Dispersão de Gás em Unidade de HDT

Até o presente momento, todos os esforços empreendidos buscavam determinar, fundamentalmente, qual seria a melhor modelagem para representar um escoamento sônico de gás. Além disso, uma segunda meta seria determinar qual a melhor condição de contorno para entrada de gás no domínio, usando um furo na geometria ou o *source point*.

Vários experimentos foram conduzidos, através da realização dos Testes Modelo, para que os objetivos acima fossem alcançados, e, posteriormente, validou-se a modelagem escolhida com dados experimentais obtidos na literatura.

A partir de agora, o foco é realizar, com o uso da modelagem validada, dispersões de gás na unidade de HDT.

Os possíveis pontos de vazamento são identificados através da Análise Preliminar de Perigos (APP), estudo qualitativo de riscos que identifica cenários de liberações líquidas ou gasosas em instalações industriais. Como uma planta de processo apresenta dezenas de cenários de liberações gasosas, ficaria inviável, para a finalidade do presente trabalho, realizar simulações de dispersão em todos esses cenários. Desta forma, optou-se por considerar apenas o cenário de vazamento nos compressores de reposição de hidrogênio (C-02A e C-02B), localizados na casa de compressores norte da unidade de hidrotratamento (Figura 22). O motivo da escolha se deve ao fato de compressores serem os equipamentos que oferecem maior probabilidade de vazamento (Fleck, 2008).

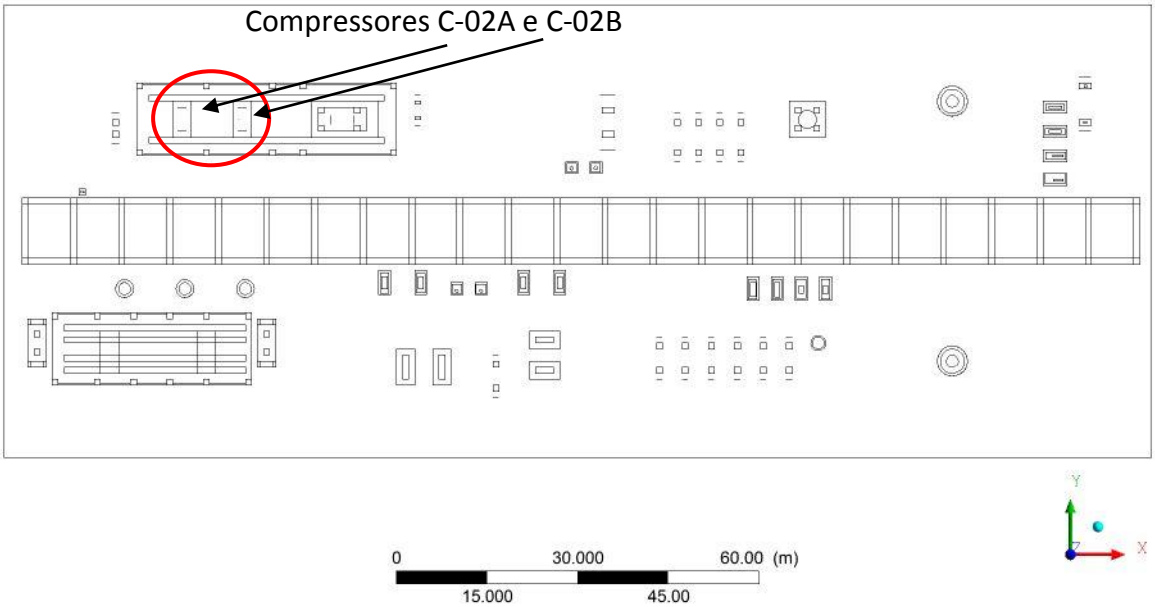


Figura 22: Compressores de H_2 selecionados para representar o vazamento de gás na unidade.

5.4.1. Geometria e Malha

A geometria utilizada, que possui 190 x 75 x 60 m, foi construída de forma similar a uma unidade de HDT da PETROBRAS. A única simplificação feita foi a exclusão das tubulações, pois não haveria recurso computacional suficiente para construção da malha. A mesma simplificação foi adotada, por exemplo, por Fleck (2008).

A Figura 23 apresenta o modelo da unidade, sendo que a este modelo foi adicionado um contorno equivalente ao ar ambiente no entorno da mesma.

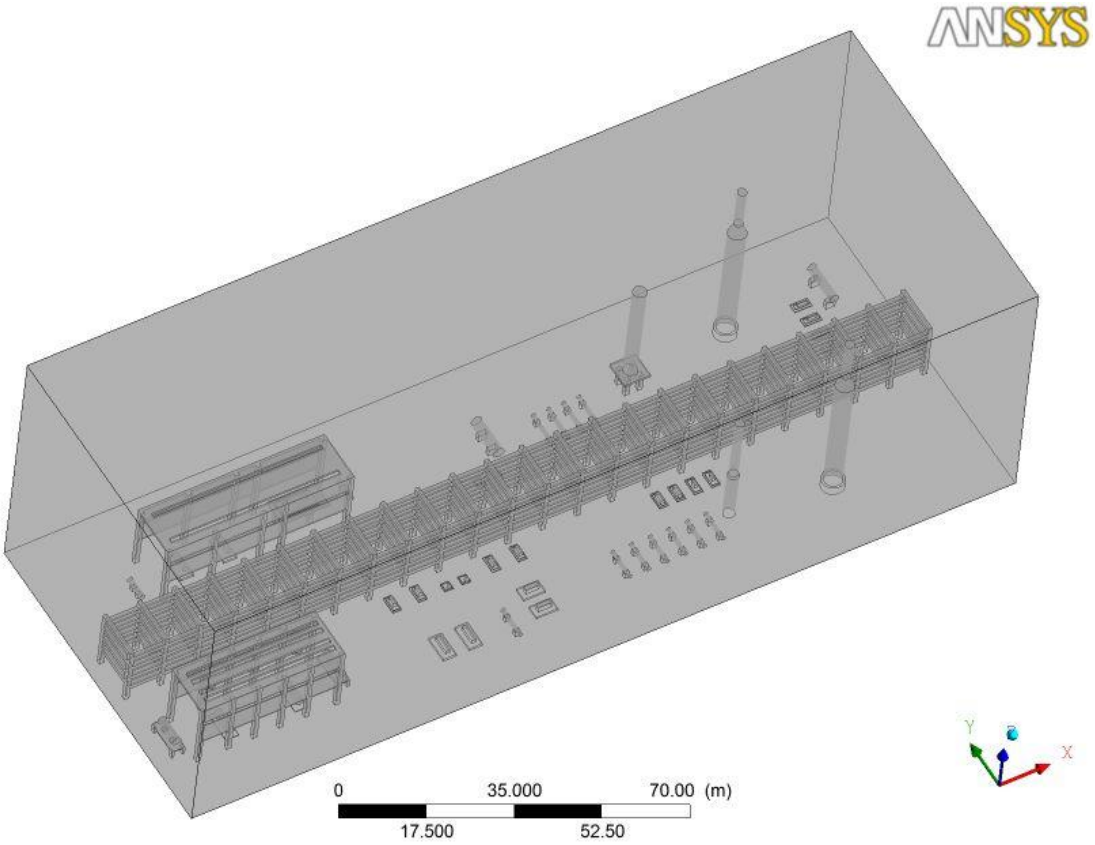


Figura 23: Geometria da unidade de HDT.

Devido à inviabilidade da construção de malhas estruturadas, foram usadas malha não-estruturadas, constituídas por elementos tetraédricos. Apesar de alguns autores usarem malhas prismáticas (*inflated boundaries*) próximas à parede, optou-se pela não adoção desta tática, visto que em estudos de dispersão o grande interesse se encontra na dispersão dos gases no seio do domínio. Além disso, os maiores gradientes se encontram localizados próximos à liberação do gás, dedicando-se, portanto, o esforço computacional para um maior refinamento nesta região. Ademais, nos pontos de liberação considerados neste estudo, o perfil de escoamento do vento já se encontra completamente desenvolvido, não sofrendo qualquer influência da condição de não deslizamento na parede, isto é, de velocidade igual a zero no piso da unidade.

A malha usada nos estudos foi criada usando o programa ANSYS Meshing, e, como veremos a seguir, possui em torno de 761 mil nós e 4 milhões e 200 mil elementos, podendo ser visualizada na Figura 24.

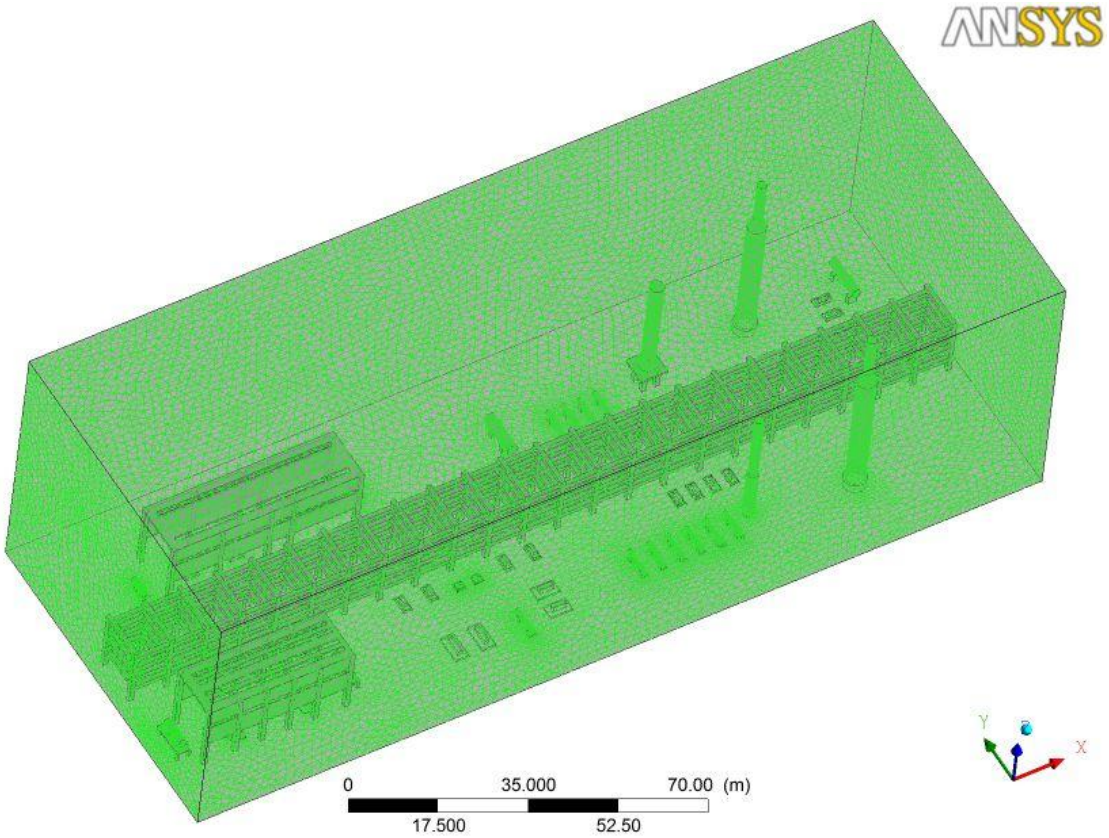


Figura 24: Malha gerada no ANSYS Meshing, a partir da geometria da unidade.

5.4.2. Teste de Independência de Malha

Buscando eliminar a influência da malha nos resultados da dispersão, foi conduzido um teste de independência de malha. Desta forma, foram realizadas simulações de um mesmo caso, ou seja, mesmos: equipamento, direção do vazamento e direção e velocidade de vento, aumentando-se o refinamento da malha, até que a concentração de H_2 não se alterasse significativamente.

A partir do perfil da dispersão de hidrogênio obtida na primeira simulação, malha A, foram criados, no CFX-Post, pontos aleatórios para que a concentração de H_2 fosse medida e comparada com os resultados das outras malhas (Figura 25).

Foi necessária a confecção de 4 malhas (A a D) até que fossem obtidas concentrações que sofressem pouca variação devido ao refino da malha, obtendo-se assim, a independência de malha no resultado da dispersão. As coordenadas dos pontos, bem como os valores da concentração do gás são apresentados na seção 6.3.1.

Desta forma, a malha C, com 761.193 nós e 4.292.399 elementos é a malha escolhida para a realização das simulações.

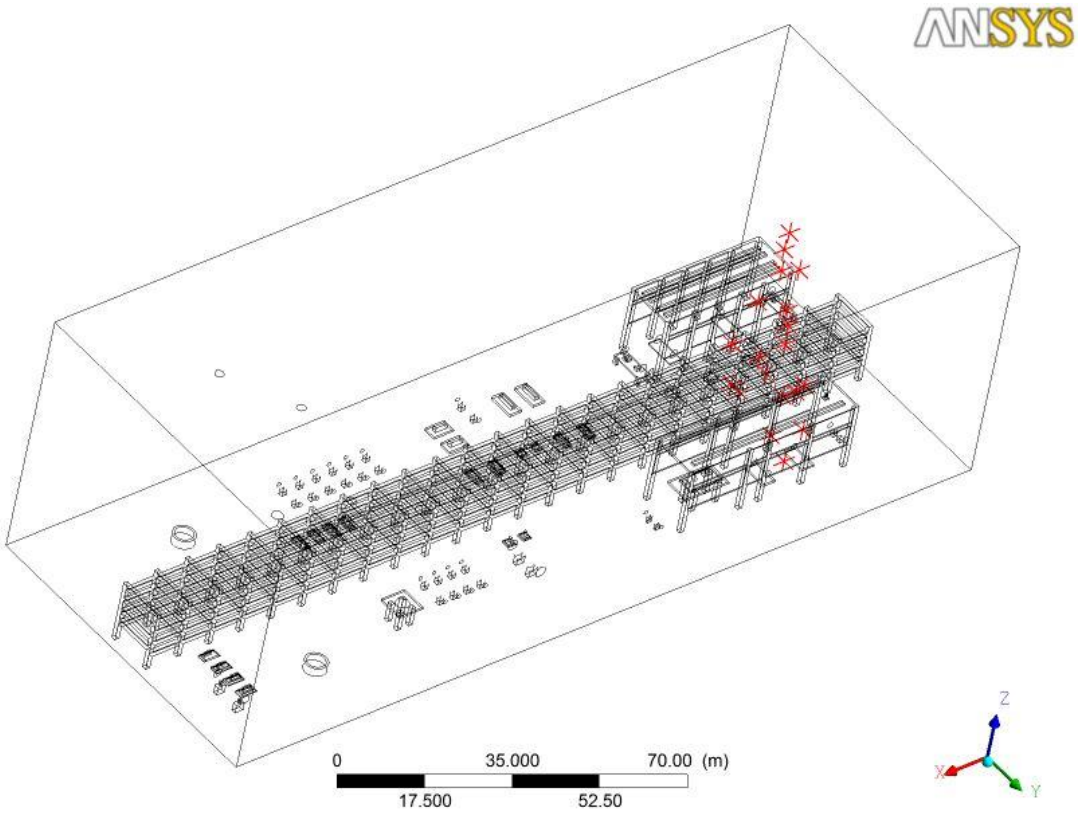


Figura 25: Teste de independência de malha: pontos de medição da concentração de H_2.

Os principais parâmetros das malhas, e os seus respectivos valores, estão descritos na Tabela 8. Nesta tabela também são apresentados 2 parâmetros que medem a qualidade da malha, *ortogonal quality* e *skewness*, que serão comentados a seguir.

Tabela 8: Parâmetros das malhas.

PARÂMETRO	**MALHA**			
	A	**B**	**C**	**D**
Número de nós	381.196	482.667	761.193	796.120
Número de elementos	2.110.931	2.687.290	4.292.399	4.593.334
Tamanho mín. do elemento (m)	$5{,}0 \times 10^{-3}$	$1{,}0 \times 10^{-3}$	$5{,}0 \times 10^{-4}$	$5{,}0 \times 10^{-4}$
Tamanho máx. do elemento (m)	6,00	5,00	4,00	3,80
Tamanho máx. da face (m)	3,00	2,00	1,50	1,45
Razão de crescimento	1,20	1,20	1,18	1,17
Ortogonal quality (média)	0,8516	0,8569	0,8607	0,8611
Skewness (média)	0,2416	0,2320	0,2247	0,2239

A distribuição dos 4.292.399 elementos da malha C está apresentada na Figura 26 e Figura 28, para *skewness* e *orthogonal quality*, respectivamente.

Pode ser observado na Figura 26 e com base no que foi descrito na seção 4.4.1, que, para o *skewness*, não existem elementos inaceitáveis e somente 334 elementos são caracterizados como ruins. 99,5% dos elementos estão na faixa de bom a excelente, sendo que cerca de 80% destes são excelentes.

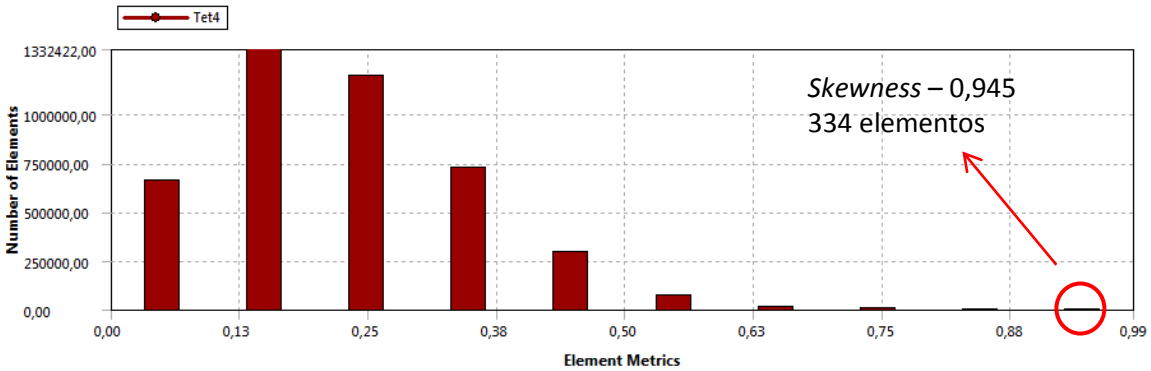


Figura 26: Distribuição dos elementos da malha pelo parâmetro *skewness*.

Praticamente todos os elementos classificados como ruins estão em estruturas ou em regiões que não serão atingidas pelas dispersões dos casos que serão simulados (Figura 27).

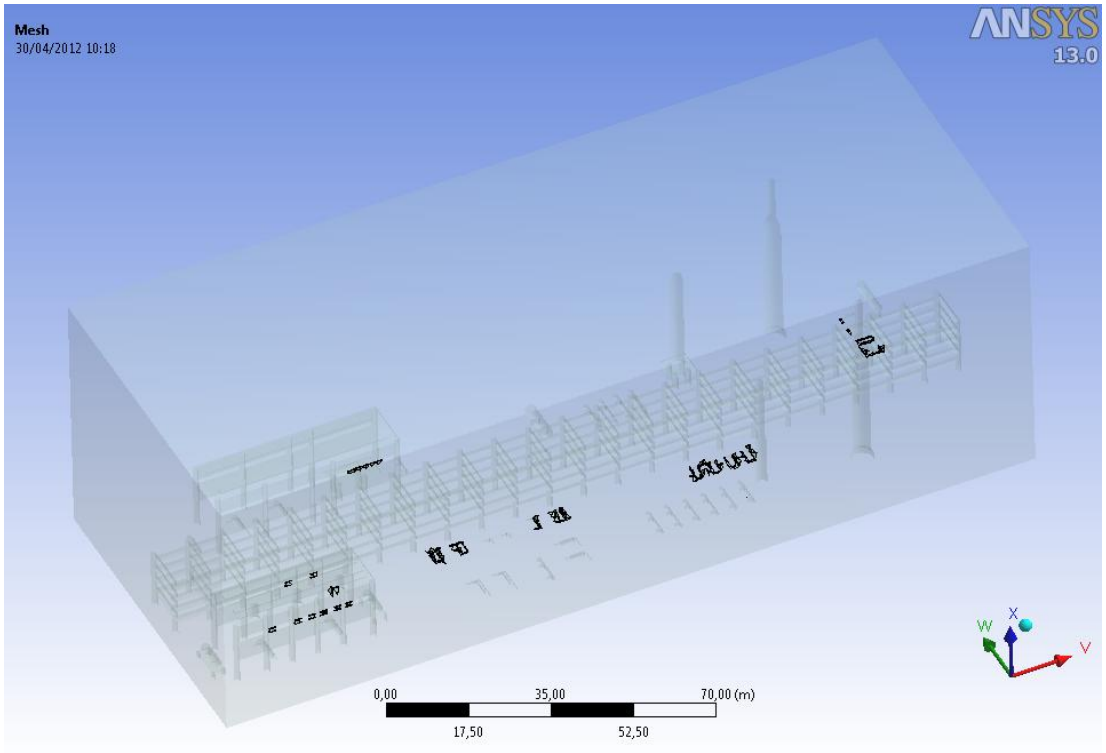


Figura 27: Representação dos elementos classificados como tendo um *skewness* de baixa qualidade.

Já para o *orthogonal quality*, também com base na seção 4.4.1, não há elementos inaceitáveis ou ruins. Existem 588 elementos classificados como aceitáveis (58 com 0,1 e 530 com 0,19) e mais de 90% dos elementos são considerados muito bons.

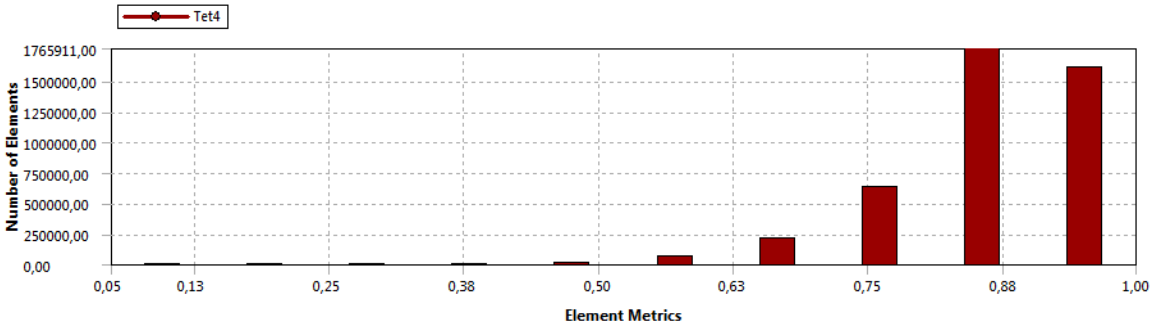


Figura 28: Distribuição dos elementos da malha pelo parâmetro *orthogonal quality*.

5.4.3. Características do Vazamento e Condições de Contorno

Sugere-se, sempre que possível, analisar 6 direções ortogonais para o vazamento, em cada ponto selecionado (Strϕm e Bakke, 1999). A quantidade de gás próxima ao limite de inflamabilidade é muito sensível a pequenas variações na direção, taxa, localização e tipo de vazamento (Fleck, 2008). Mudando a direção de vazamento em 90°, o volume de gás

próximo ao estequiométrico mudou de um preenchimento de 10% para 65% do módulo em questão (Bakke e Hansen, 2003 apud Fleck, 2008).

Entretanto, caso fossem realizadas simulações para 6 direções ortogonais do vazamento, teríamos um número extremamente elevado de simulações: 2 pontos de vazamento x 8 direções de vento x 6 direções de vazamento, ou seja, 96 simulações.

Numa unidade de processo convencional existem dezenas de cenários de vazamentos, de forma que simular 6 direções de vazamento para cada cenário praticamente inviabilizaria os prazos dos projetos, quer seja pelo esforço computacional, quer seja pelo tempo necessário para realizar todas as simulações.

Segundo Bakke e Hansen, 2003 (apud Fleck, 2008), suposições podem limitar o número de simulações em CFD, desde que a validação esteja documentada. Desta forma, seguiu-se a recomendação de Fleck (2008) de que para estudos de dispersão de gases com auxílio de CFD deve-se dar preferência para vazamentos direcionados para o piso da unidade, ou situações onde haja obstáculo na saída do jato, confinando parcialmente o gás e aumentando a mistura hidrocarboneto/ar, ou seja, o volume inflamável.

Sendo assim, 2 direções de vazamento em cada compressor foram utilizadas para a realização das simulações: para o piso da unidade em ambos os compressores, para leste da unidade no compressor C-02A, e para oeste da unidade no compressor C-02B.

A identificação dos vazamentos pode ser feita com o auxílio dos eixos disponíveis na Figura 22: o eixo X representa as direções leste (sentido positivo dos X) e oeste (sentido negativo dos X). É possível perceber, portanto, que um vazamento no compressor C-02A para a direção leste terá o compressor C-02B como obstáculo, e um vazamento no compressor C-02B para a direção oeste terá o C-02A como obstáculo.

Todas as simulações foram realizadas usando-se a mesma geometria e malha da unidade idealizada, onde os parâmetros que variaram foram: direção da entrada do vento e sua respectiva velocidade e a direção do vazamento. Na Tabela 9 estão especificadas as simulações realizadas.

Tabela 9: Especificação das simulações realizadas.

Cenário	Equipamento	Direção do vento	Direção do vazamento
1	C-02A	Norte	Baixo
2	C-02A	Norte	Leste
3	C-02B	Norte	Baixo
4	C-02B	Norte	Oeste
5	C-02A	Sul	Baixo
6	C-02A	Sul	Leste
7	C-02B	Sul	Baixo
8	C-02B	Sul	Oeste
9	C-02A	Leste	Baixo
10	C-02A	Leste	Leste
11	C-02B	Leste	Baixo
12	C-02B	Leste	Oeste
13	C-02A	Oeste	Baixo
14	C-02A	Oeste	Leste
15	C-02B	Oeste	Baixo
16	C-02B	Oeste	Oeste
17	C-02A	Nordeste	Baixo
18	C-02A	Nordeste	Leste
19	C-02B	Nordeste	Baixo
20	C-02B	Nordeste	Oeste
21	C-02A	Noroeste	Baixo
22	C-02A	Noroeste	Leste
23	C-02B	Noroeste	Baixo
24	C-02B	Noroeste	Oeste
25	C-02A	Sudeste	Baixo
26	C-02A	Sudeste	Leste
27	C-02B	Sudeste	Baixo
28	C-02B	Sudeste	Oeste
29	C-02A	Sudoeste	Baixo
30	C-02A	Sudoeste	Leste
31	C-02B	Sudoeste	Baixo
32	C-02B	Sudoeste	Oeste

As condições de operação do compressor e as condições atmosféricas são as mesmas do caso 4 do Teste Modelo: sônico, com uso do *source point*. Desta forma, as condições de contorno são semelhantes e estão reproduzidas na Tabela 10. A única diferença é que, desta vez, existe a influência dos ventos onde a unidade encontra-se instalada.

Tabela 10: Unidade de HDT - Condições de contorno e parâmetros da simulação

Condição de contorno / Parâmetro	Valor
Vazamento de gás (*inlet*)	0,1637 Kg/s e 1460 m/s
Entrada do vento (*inlet*)	Conforme Tabela 11
Equipamentos, estruturas e piso da unidade (*wall*)	*No slip*
Saídas do vento (*opening*)	P_{set} = 0 atm
Pressão de referência: Domínio	P = 1 atm
Regime de escoamento	Estacionário
Tipo de escoamento	Sônico
Modelo de turbulência: Domínio	κ-ε
Modelo de turbulência: Entrada de gás	*High* (*Intensity* = 10%)
Condições iniciais no domínio	Ar = 100% vol e 25 °C
Critério de convergência	RMS (raiz do desvio quadrado médio)
Resíduo máximo permitido	10^{-6}

5.4.4. Definição das Condições Meteorológicas da Região da Unidade

A ventilação natural é uma condição de contorno de grande importância em um estudo de dispersão de gases, visto que ela influencia diretamente a dispersão do gás inflamável, concentrado menos ou mais a mistura explosiva na atmosfera. Ela pode ser afetada pelo arranjo e quantidade de equipamentos da unidade. Assim, as condições de ventilação dentro da unidade requerem uma boa representação, de tal maneira que sejam provenientes de dados meteorológicos da região de estudo (Strφm e Bakke, 1999), tornando a simulação numérica mais realista.

As condições meteorológicas estabelecem a velocidade média dos ventos e probabilidades de ocorrência. Como todas as direções de vento serão simuladas, a Tabela 11 apresenta somente a direção e a velocidade dos ventos, sem a necessidade de informar a probabilidade dos mesmos.

Tabela 11: Direção dos ventos e suas respectivas velocidades médias (Fonte: Estação Sambaetiba).

Direção	Velocidade média (m/s)
Norte	0,9246
Sul	1,5967
Leste	1,7648
Oeste	1,0153
Nordeste	1,4360
Noroeste	0,7009
Sudeste	2,3788
Sudoeste	1,2331

O Norte de projeto é alinhado ao Norte verdadeiro. A Figura 29 apresenta a Rosa dos Ventos para a unidade. É importante salientar que o vento norte provém do norte e vai para o sul; o vento sul provém do sul e vai para o norte, e assim sucessivamente.

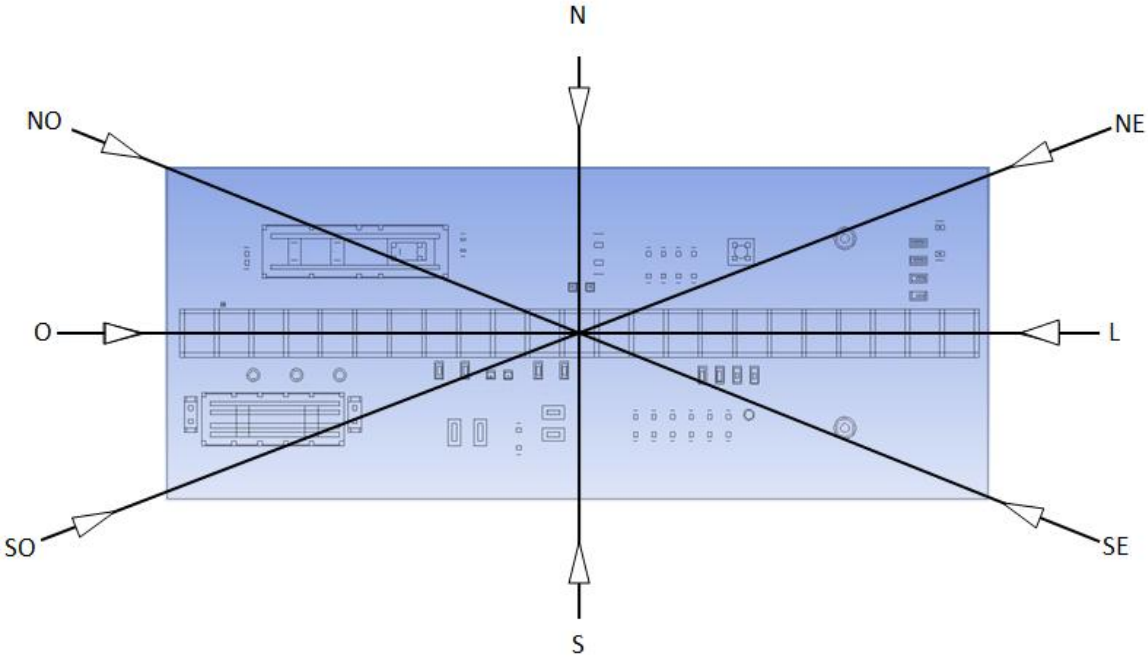


Figura 29: Rosa dos Ventos da unidade.

Os ventos nordeste, noroeste, sudeste e sudoeste entram na unidade formando um ângulo de 45° com a mesma. É necessário que seja feita a decomposição dos vetores velocidade desses ventos para possibilitar a entrada de dados no CFX-Pre. O vento noroeste, por exemplo, será decomposto nos ventos norte e oeste, conforme Figura 30. O mesmo foi realizado para os ventos nordeste, sudeste e sudoeste.

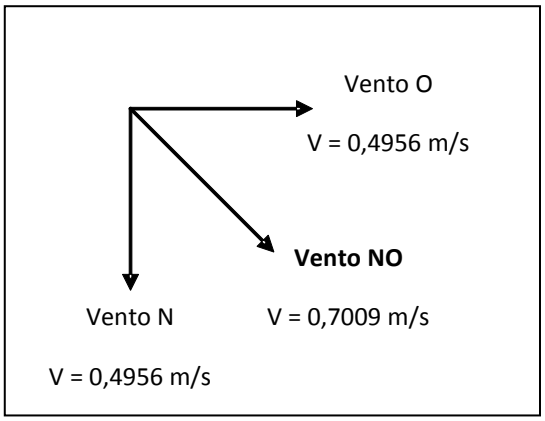


Figura 30: Decomposição do vetor velocidade do vento noroeste.

No CFX-Pre foram definidas as regiões 2D, ou seja, as faces do domínio (volume de controle) que correspondem a cada coordenada da Rosa dos Ventos, e que representam a entrada de vento no domínio.

5.5. Posicionamento dos Detectores de Gás

Liberações acidentais de gases em plantas de processo podem levar a acumulações de misturas explosivas. Sistemas de detecção de gás são, então, instalados na tentativa de se evitar que essas acumulações se formem e suas possíveis conseqüências.

Geralmente é aceita a orientação proposta pelas seguradoras que recomenda o espaçamento de detectores pontuais de gás numa malha de 5 x 5 m. Esta regra é derivada de estudos que mostram que quando uma nuvem estequiométrica de 6 m de comprimento de metano sofre ignição, a velocidade de chama não excede 100 m/s em um grande volume não-confinado, com ou sem obstáculos, ou em um volume confinado e ventilado com níveis de obstrução da ordem de até 0,4 (volume bloqueado/volume total). Sobrepressões resultantes de velocidades de chama menores que 100 m/s serão menores que 150 mbar (0,15 atm), consideradas inferiores a níveis onde possam ocorrer danos (Kelsey *et al*., 2002).

Neste momento cabe salientar que não foram encontradas referências na literatura que indicassem o espaçamento de detectores numa malha para liberações de hidrogênio.

5.5.1. Metodologia Proposta

Na avaliação do posicionamento dos detectores de gás é fácil compreender que esta tarefa deve ser feita considerando, de uma única vez, a sobreposição de todas as nuvens geradas por todas as simulações do estudo de dispersão, e, de maneira geral, a avaliação é feita alocando-se detectores em pontos (coordenadas) que detectem mais de uma nuvem, de forma que, com um número mínimo de detectores, todas as nuvens possam ser detectadas.

Fica claro que para uma unidade de processo, ou mesmo uma plataforma de petróleo, onde existem dezenas de cenários de vazamento, analisar manual e visualmente todas as nuvens formadas é uma tarefa muito complexa, que pode, simplesmente, inviabilizar um correto posicionamento dos detectores, sem considerar, ainda, os possíveis erros humanos decorrentes da visualização da nuvem 3D no CFX-Post.

Sendo assim, foi criado, para uso na PETROBRAS, um programa computacional capaz de realizar, de maneira rápida e eficiente, a avaliação do posicionamento dos detectores, independentemente do número de nuvens geradas pelo estudo de dispersão de gases, eliminando o empirismo desta etapa.

Durante o desenvolvimento desta rotina foi adotada como premissa que todos os vazamentos devem ser detectados, independente do tamanho da nuvem formada. Esta é uma forma conservativa para tentar reduzir algumas incertezas do estudo, como o diâmetro de orifício utilizado para o cálculo da vazão mássica de gás vazado. Como visto, adotou-se o valor de 10 mm, pois, a maioria dos vazamentos ocorre até este tamanho de furo. Desta forma, quando se diz que o volume da nuvem é pequeno e não implica em maiores riscos, este diâmetro é um dos parâmetros que leva a esta conclusão. Porém, se o vazamento ocorresse num orifício com diâmetro maior e caso não houvesse sido previsto detector devido ao fato do volume da nuvem ser considerado de extensão desprezível, o mesmo, possivelmente, não seria detectado.

O programa desenvolvido é composto pelas seguintes etapas:

- Gerar matriz 3D de possíveis pontos de detecção, no espaçamento desejado e na região de interesse;
- Coletar a concentração da substância avaliada nos possíveis pontos de detecção, através de um programa de CFD, para cada caso individualmente;

- Organizar os dados em uma tabela que contenha em cada linha um possível detector (possível ponto de detecção) e nas colunas a concentração, nesses pontos, de todos os casos avaliados, chamada de Matriz de Busca Inicial;
- As linhas são ordenadas pela quantidade de casos que são capazes de detectar;
- O ponto que é capaz de anunciar a maior quantidade de casos é selecionado (deixa de ser considerado um possível ponto de detecção para ser chamado de ponto de detecção);
- Os pontos (linhas) que detectam somente os casos que já foram detectados são descartados;
- As colunas contendo os casos que já foram detectados também são excluídas. Com isso, evita-se selecionar uma nova posição que contenha os casos já selecionados na iteração anterior;
- Este processo é realizado até não restarem mais casos, ou seja, até que todos os casos tenham sido detectados;
- Ao final da rotina são gerados:
    - Uma matriz contendo a coordenada dos detectores;
    - Um arquivo em .txt onde ficam armazenados a quantidade de detectores, coordenadas dos detectores e os casos que cada detector é capaz de medir.

Após a realização deste processo é preciso avaliar a viabilidade da alocação dos detectores nas coordenadas propostas pela rotina computacional, uma vez que é necessário, na visualização da maquete 3D, verificar se cada detector encontra-se em uma rota de fuga, em um pátio de manutenção ou em um local de difícil fixação. Caso o ponto sugerido não possa ser utilizado, uma nova avaliação é feita, excluindo-se este ponto da matriz.

A malha inicial gerada (Figura 31 e Figura 32) está espaçada de 5 x 5 m, tendo um total de 855 possíveis pontos de detecção. Posteriormente, e para efeito de comparação, foi gerada uma segunda malha com espaçamento de 3 x 3 m, com um total de 3472 pontos.

Como os cenários de vazamento do presente trabalho são os dois compressores situados na casa de compressores norte, a malha dos possíveis pontos de detecção proposta não abrange toda a unidade, ficando restrita a uma região específica da mesma, como pode ser observado na Figura 31. Isto foi feito apenas para reduzir a quantidade de pontos que seriam gerados sem necessidade. No caso de existirem cenários de vazamento espalhados

por toda a unidade, de maneira simples poderia ser gerada uma malha que contemplasse pontos em toda esta região.

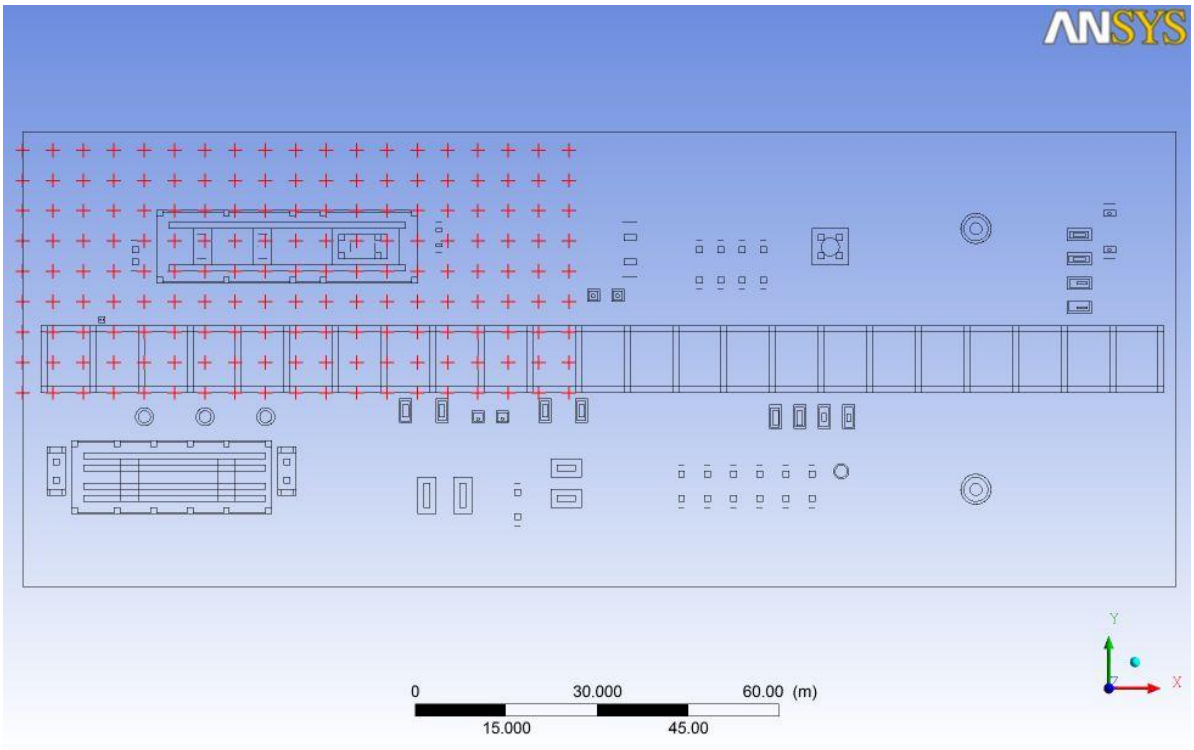


Figura 31: Vista superior dos possíveis pontos de detecção num espaçamento 5 x 5 m.

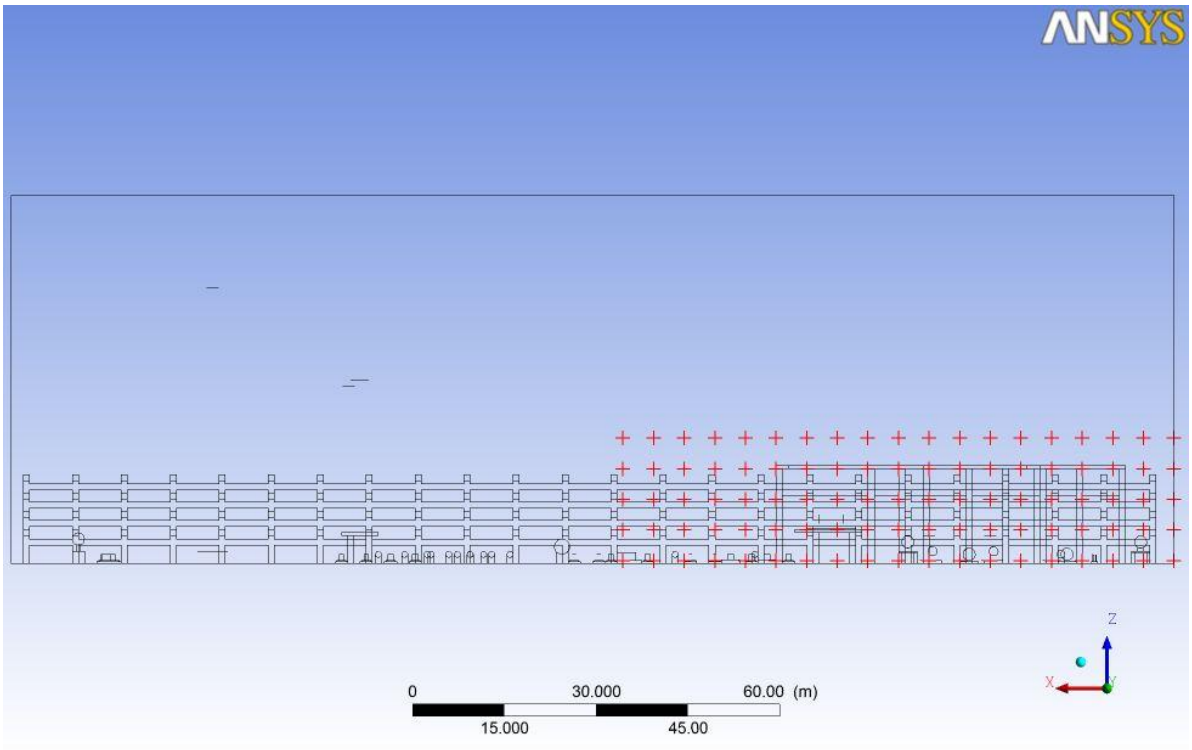


Figura 32: Vista sul dos possíveis pontos de detecção num espaçamento de 5 x 5 m.

6. RESULTADOS E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

6.1. Testes Modelo

Na simulação de dispersão de gases é importante conhecer os perfis de velocidade do vento e do gás vazado gerados no volume de controle adotado, além disso, objetivam-se, principalmente, as concentrações dos gases liberados no vazamento e o perfil da nuvem formada. Desta forma, alguns parâmetros importantes foram avaliados nos resultados das simulações.

A Figura 33 apresenta o perfil de velocidade do hidrogênio na linha central do cilindro ($0 \leq Z \leq 8$ M). É importante observar, em especial, as velocidades nos casos sônicos, 4 e 5. Após o gás ser liberado a uma velocidade de 1460 m/s, no início do processo de expansão, e devido às ondas de choque, a velocidade apresenta um súbito aumento antes de começar a cair, conforme o distanciamento em relação ao ponto de vazamento. Este comportamento é apresentado, por exemplo, por TNO (2005) e Schefer *et al*. (2007), e já comentado neste trabalho, através da Equação 2.14.

A velocidade teórica, isto é, aquela calculada com o uso da Equação 2.14, é da ordem de 2600 m/s, um pouco menor do que a apresentada no gráfico da Figura 33.

Empiricamente, assume-se que no ponto de máxima velocidade o escoamento passa a ser considerado subsônico, apesar de isto acontecer somente alguns comprimentos a jusante deste ponto, como será visto pela análise do número de Mach.

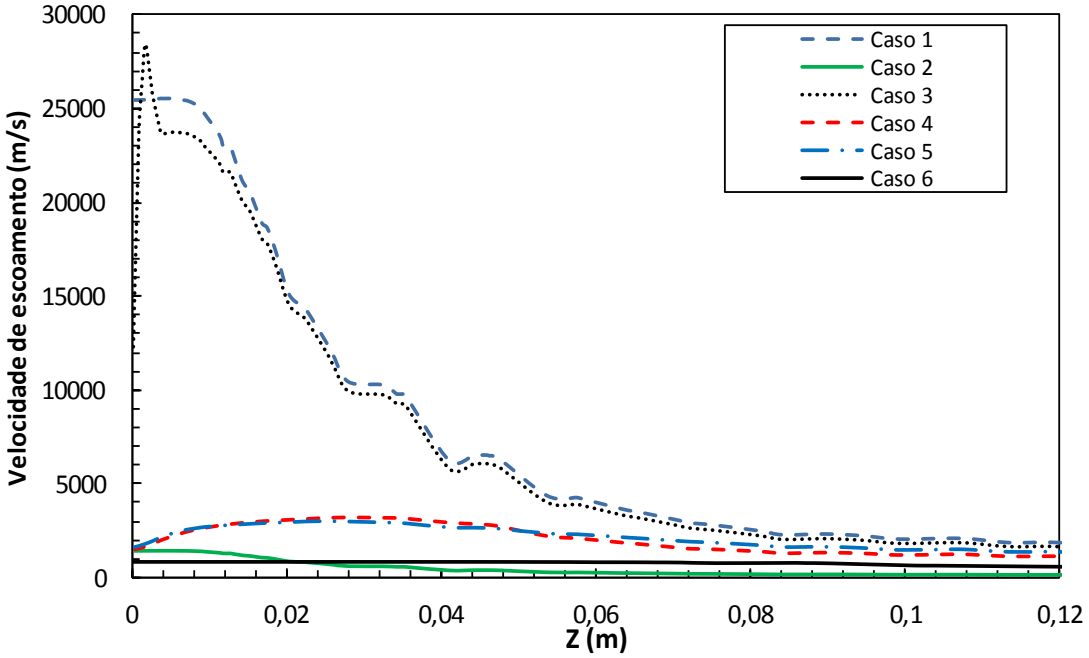


Figura 33: Velocidade de escoamento de H_2 na linha central ($0 \leq Z \leq 8$ m).

A Figura 34 mostra em detalhe a região de aumento da velocidade nos escoamentos sônicos, devido às ondas de choque, logo após o ponto de liberação de gás.

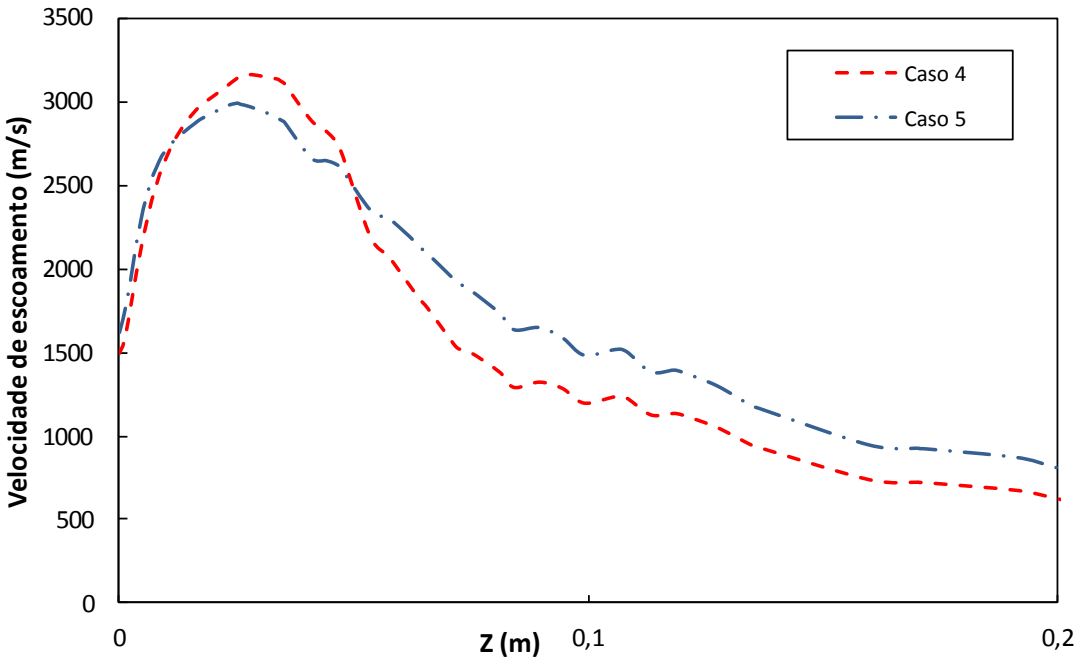


Figura 34: Velocidade de escoamento de H_2 na linha central (detalhe da região próxima ao ponto de liberação).

As velocidades irreais e extremamente elevadas encontradas nos casos subsônicos 1 e 3 não estão bem compreendidas, mas acredita-se que pelo fato da pressão ser alta no ponto de vazamento e como o gás foi considerado incompressível, essa grande energia teria sido incorporada na velocidade.

Na Figura 35 podemos observar, para os casos 4 e 5, que o número de Mach no ponto de liberação é em torno de 1,0, ou seja, o escoamento é sônico, como já comentado. Imediatamente após a liberação, coincidindo com o aumento da velocidade apresentado na Figura 33, o número de Mach tem um pico na linha central, e rapidamente volta para o valor inicial, em z em torno de 0,1 m. Esta é aproximadamente a mesma distância que a velocidade leva para retornar ao valor do ponto de liberação. Isto é importante, pois mostra que as simulações sônicas conseguiram captar as ondas de choque e o aumento da velocidade. Segundo Lees (1996), não somente na linha central, mas em uma região que compreende todo o seio do jato Mach é maior do que 1,0 e, na fronteira do jato, Mach seria 1,0 (Figura 36).

A cerca de 0,1 m do ponto de liberação, o escoamento passa a ser subsônico, pois Ma < 1 (Figura 35), e, um pouco mais à frente, em torno de 2 m, se torna incompressível, uma vez que Ma < 0,3 (Figura 37.a). A Figura 37.b apresenta um detalhe do escoamento supersônico que ocorre logo após a liberação do gás.

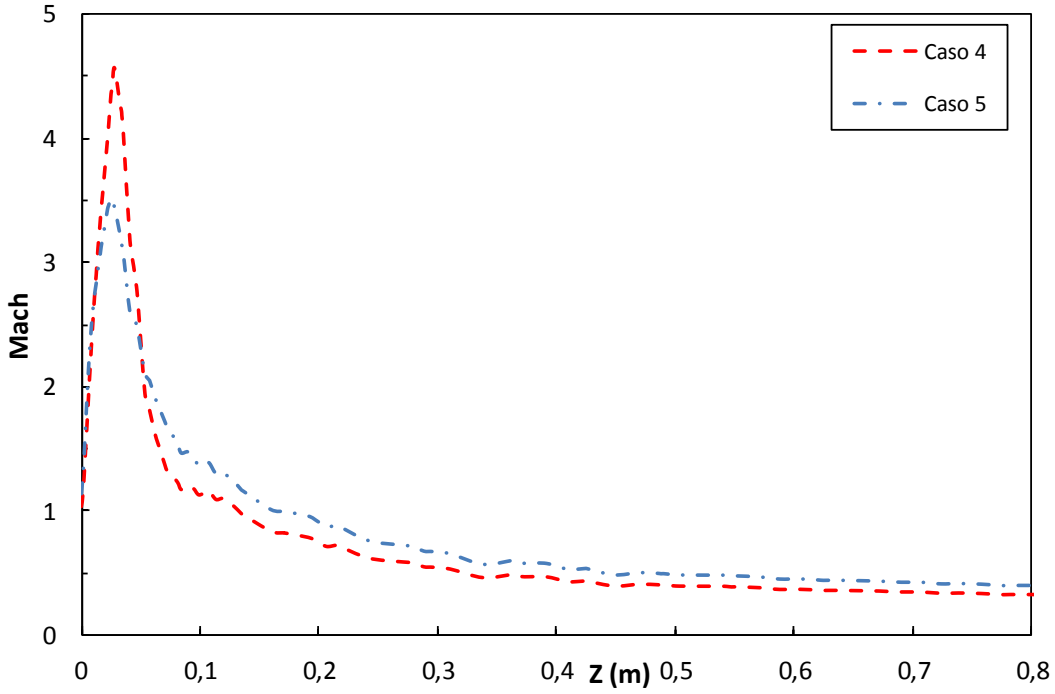


Figura 35: Número de Mach na linha central ($0 \leq Z \leq 8$ m).

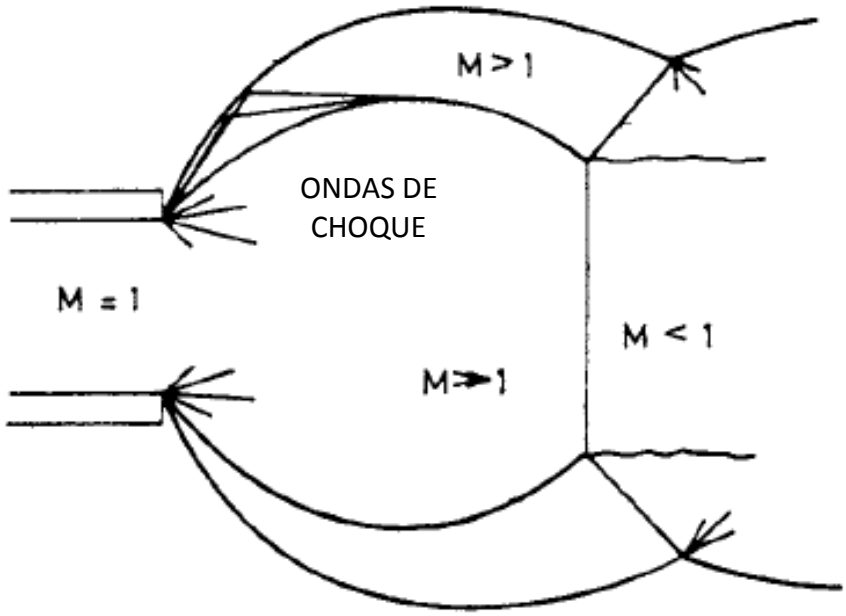


Figura 36: Comportamento do número de Mach (Ma ou M) durante o processo de expansão do gás à alta pressão – Escoamento sônico (adaptado de Lees, 1996).

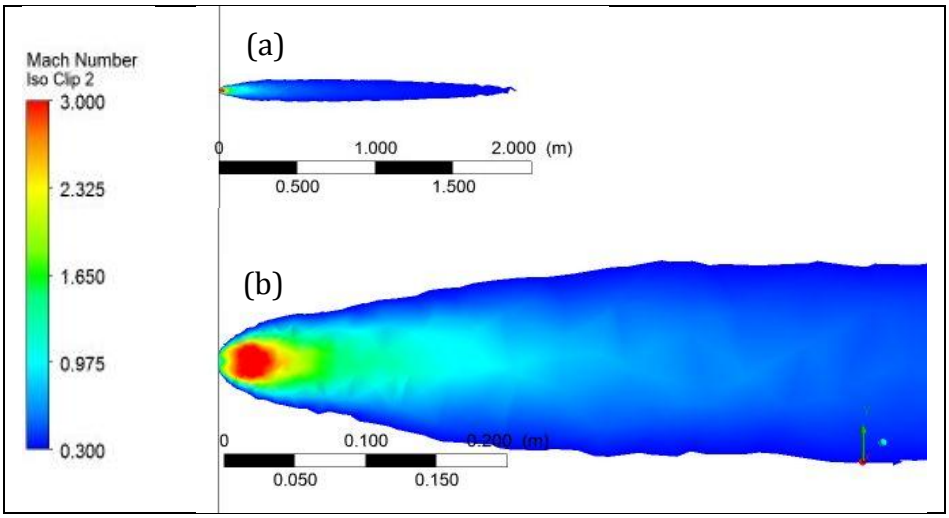


Figura 37: Número de Mach ao longo da linha central: (a) distância para atingir Ma = 0,3; (b) detalhe da região supersônica.

Na dispersão de hidrogênio na atmosfera, a densidade da mistura é um bom parâmetro para se ter noção da concentração da nuvem que está sendo formada, visto que na temperatura de 25 °C a densidade do ar é de 1,18 Kg/m^3 e a do H_2 é da ordem de 0,08 Kg/m^3, ou seja, isso significa dizer que quanto mais próximo de 1,18, menor será a concentração da nuvem de H_2.

A Figura 38 apresenta o comportamento da densidade da mistura Ar/H_2 ao longo da linha central. Nas simulações subsônicas, casos 1, 2 e 3, a densidade da mistura rapidamente se aproxima de 1,0, o que sugere que escoamentos subsônicos até podem formar nuvens da mesma ordem de grandeza em tamanho que os escoamentos sônicos, porém em menores concentrações de gás inflamável.

Já os casos sônicos, 4 e 5, como o momento do escoamento do gás é alto, favorece a ocorrência de uma nuvem mais concentrada de hidrogênio e também de maiores extensões, o que pode ser observado na figura 38, uma vez que a 8 metros do ponto de liberação a densidade da mistura ainda se encontra bem abaixo da densidade do ar.

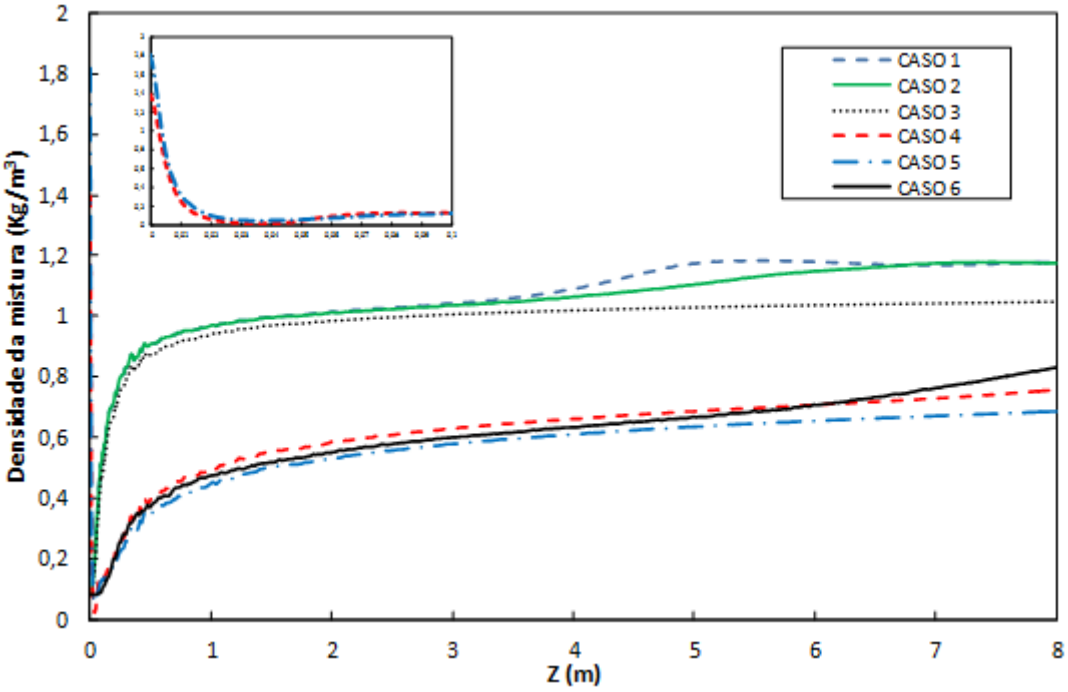


Figura 38: Densidade da mistura Ar/H_2 na linha central ($0 \leq Z \leq 8m$).

Próximo ao ponto de liberação (detalhe na Figura 38) observa-se que a densidade da mistura para as simulações sônicas, casos 4 e 5, é superior à densidade do ar. Isto é coerente, visto que os gases são compressíveis e nas condições de temperatura e pressão do vazamento a densidade do hidrogênio é de 2,38 Kg/m^3.

É interessante observar que a simulação subsônica com o uso do tronco de cone, caso 6, apresenta densidades da mistura muito semelhantes àquelas observadas para os casos sônicos, havendo apenas uma tendência de descolamento desta em relação àquelas, a partir de uma distância de cerca de 7 m, diminuindo a concentração da nuvem de hidrogênio, visto

que esse descolamento se dá no sentido da aproximação da densidade da mistura à densidade do ar. Este resultado, de certa forma, iria de encontro à teoria do uso do tronco de cone para simplificar os complexos escoamentos sônicos.

Entretanto, analisando a Figura 39, que apresenta a fração volumétrica de H_2 ao longo da linha central, observa-se que a simulação com o tronco de cone apresenta concentrações de H_2 cerca de 15 – 20 % superiores às encontradas nos escoamentos sônicos. Por outro lado, ficam claras as grandes diferenças encontradas nesses 3 casos em relação aos escoamentos subsônicos, casos 1, 2 e 3.

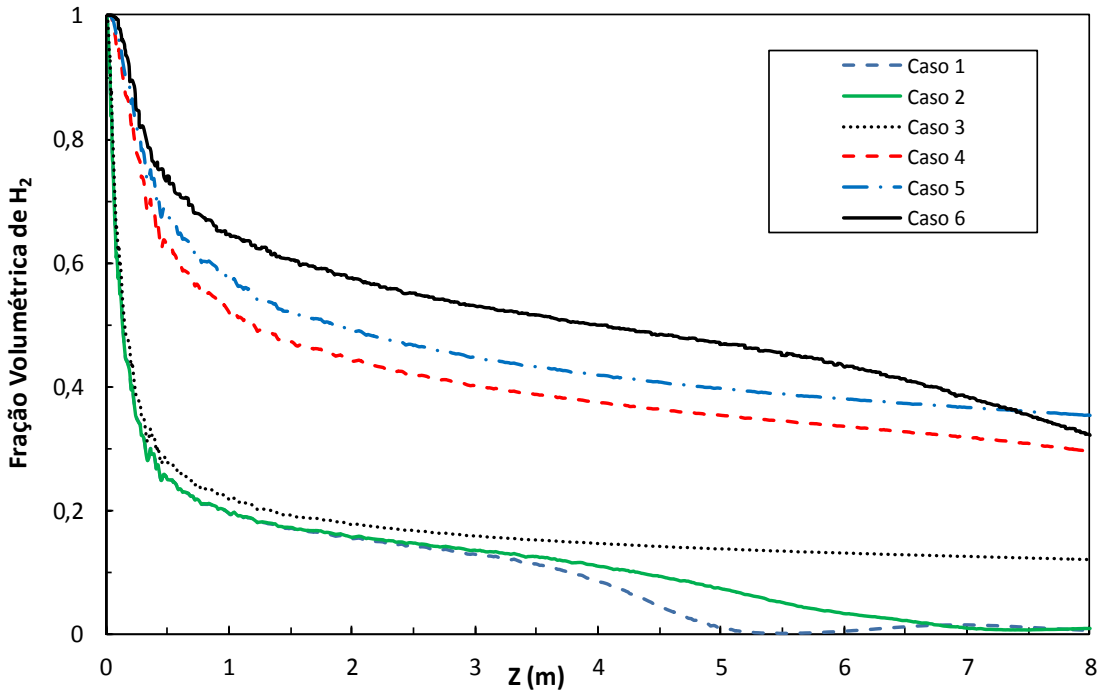


Figura 39: Fração volumétrica de H_2 na linha central ($0 \leq Z \leq 8$m).

Outra maneira de apresentar as concentrações de H_2 é, para cada altura Z, medi-las no eixo y, transversal ao cilindro. Nas Figuras 40 a 43, foram determinadas as concentrações transversalmente ao cilindro ($-0,5 \leq Y \leq 0,5$ m), nas alturas Z = 0,5, 1,5, 3,0 e 7,0 metros.

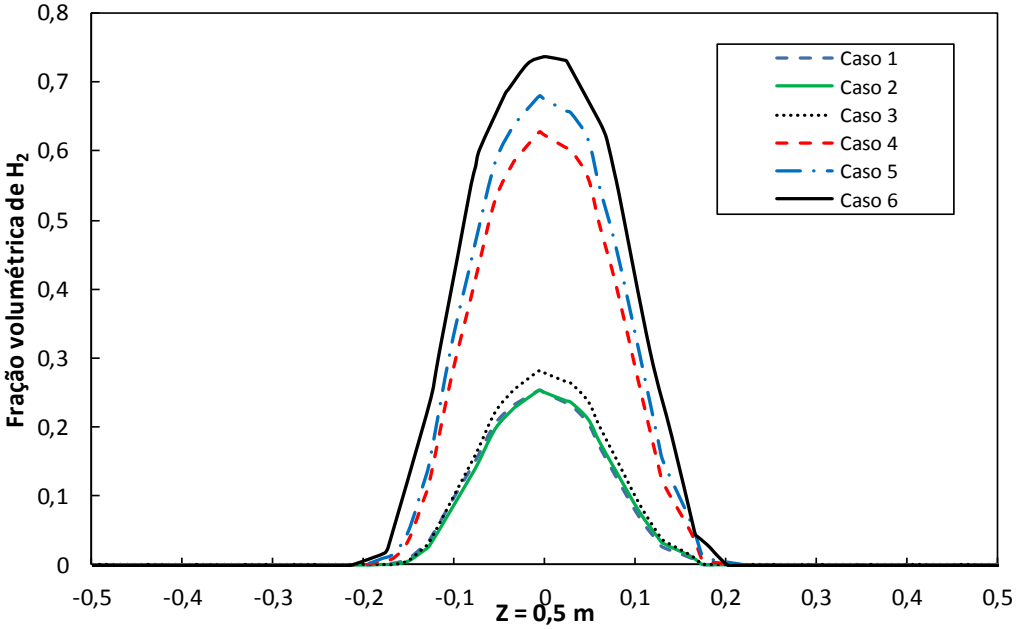


Figura 40: Fração volumétrica de H_2 ($-0,5 \leq Y \leq 0,5$m) em Z = 0,5 m.

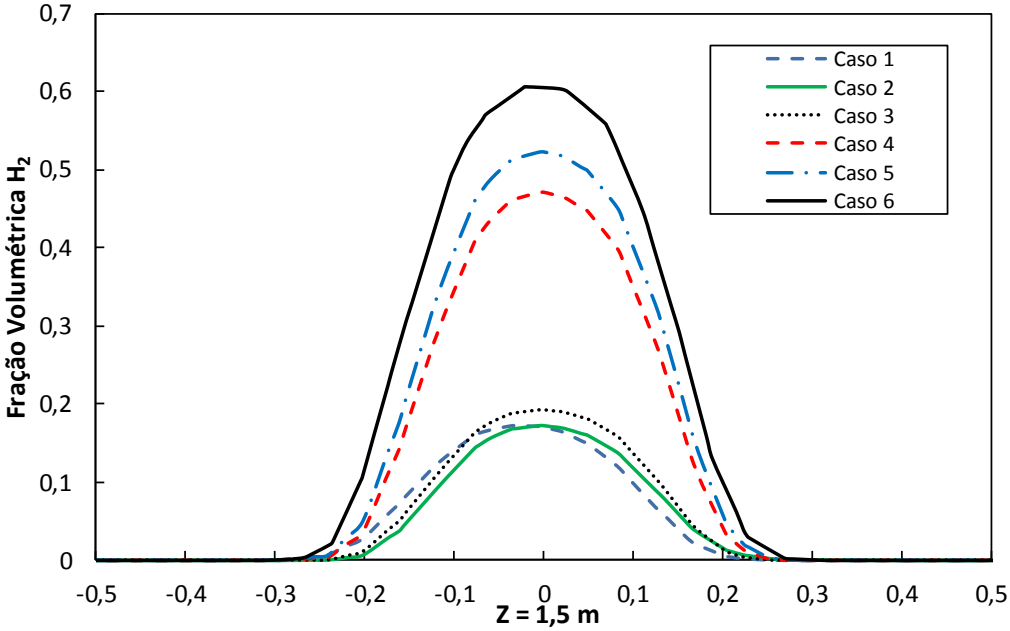


Figura 41: Fração volumétrica de H_2 ($-0,5 \leq Y \leq 0,5$m) em Z = 1,5 m.

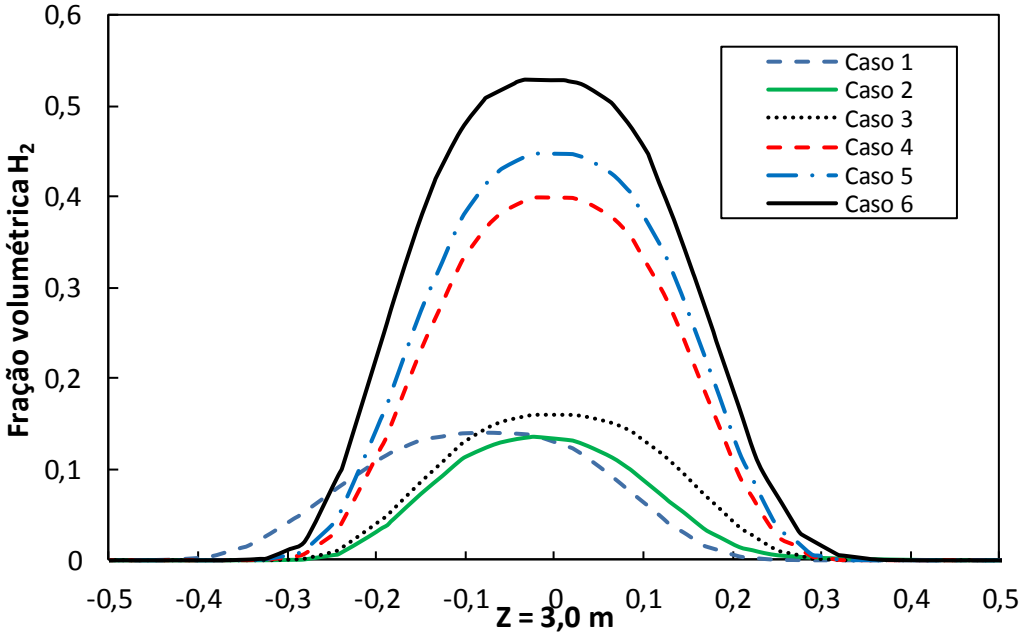


Figura 42: Fração volumétrica de H_2 ($-0,5 \leq Y \leq 0,5$m) em Z = 3,0 m.

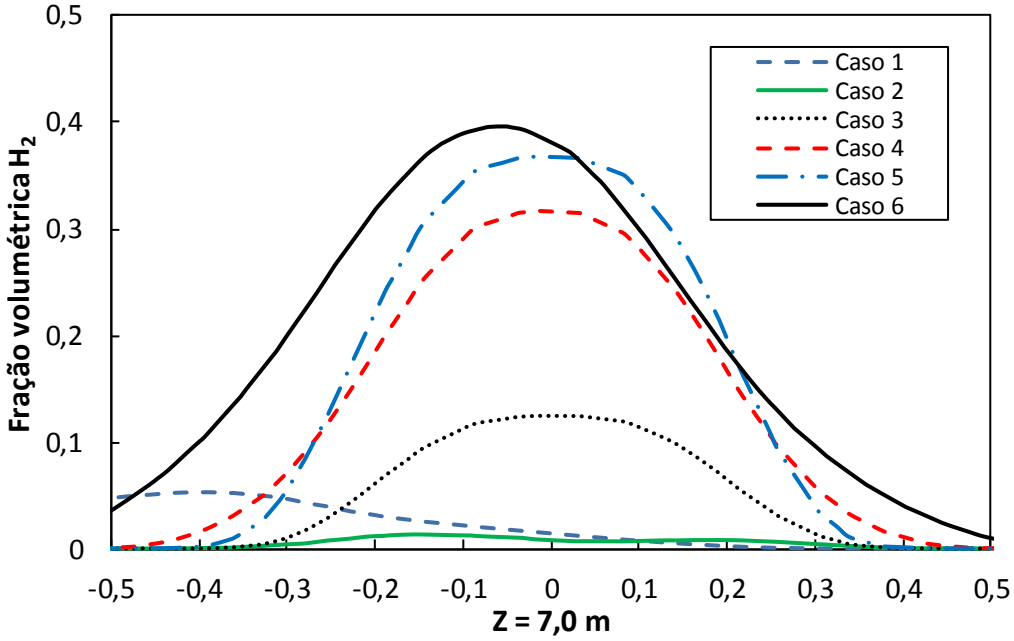


Figura 43: Fração volumétrica de H_2 ($-0,5 \leq Y \leq 0,5$m) em Z = 5,0 m.

Os resultados acima evidenciam, como já comentado no Capítulo 1, o quão importante é a determinação dos *settings* ideais para um escoamento sônico de gás na atmosfera, pois as modelagens sônicas e subsônicas, como mostrado com a realização dos Testes Modelo,

apresentaram resultados bastante diferentes entre si, quando da tentativa de reproduzir numericamente o escoamento sônico.

É interessante, portanto, que a validação do modelo possa ser feita confrontando os seus resultados com resultados experimentais de liberação de gases inflamáveis a altas pressões, obtidos na literatura.

Vimos também que os escoamentos sônicos com o uso do *source point* ou do furo para representar a liberação do gás, casos 4 e 5, respectivamente, apresentaram resultados semelhantes. Entretanto, a convergência das simulações em cada caso foi algo que chamou a atenção. Para as simulações com o uso do *source point*, a mesma ocorreu em torno de 350 iterações, levando cerca de 2 horas, e o desequilíbrio (*imbalance*) de massa de H_2 no domínio foi de 0,42%. Já para a condição de entrada com furo, a convergência se deu com 3042 iterações, tendo levado aproximadamente 15 horas, e com desequilíbrio de massa de H_2 de 0,0008%.

Por experiência da comunidade envolvida em estudos de dispersão de gases com uso de CFD, no que tange ao desequilíbrio de massa no domínio de interesse, valores inferiores a ± 1% do gás vazado podem ser considerados adequados.

Desta forma, o modelo proposto para ser validado será aquele com escoamento sônico e entrada de gás no domínio através do *source point*. Também serão analisados os resultados obtidos pela simulação subsônica com o uso de tronco de cone (*pseudo source*), visto ser esta uma aproximação muito comentada na literatura, por exemplo, por Fleck (2008), HSL (2005), TNO (2005), entre outros.

6.2. Validação da Simulação Numérica

O objetivo principal desta validação é o de verificar se a modelagem sônica de um vazamento de gás a altas pressões, utilizando o *source point* como termo fonte, fornece boas respostas, quando comparadas com dados reais de liberações a altas pressões. Em caso positivo, esta modelagem seria, então, utilizada para a realização das simulações de vazamento de gás na unidade de processo.

Não obstante, buscou-se avaliar se a modelagem de escoamento subsônico com o uso do tronco de cone também apresenta bom ajuste quando comparado aos dados reais.

Exatamente como no artigo, foram criados 9 pontos para o monitoramento da concentração de H_2, de 1 em 1 m, a partir de 3 e até 11 m do ponto de liberação do gás.

A Figura 44 apresenta as concentrações de H_2 obtidas nos dados experimentais, e também para as simulações sônica e subsônica, esta última com tronco de cone.

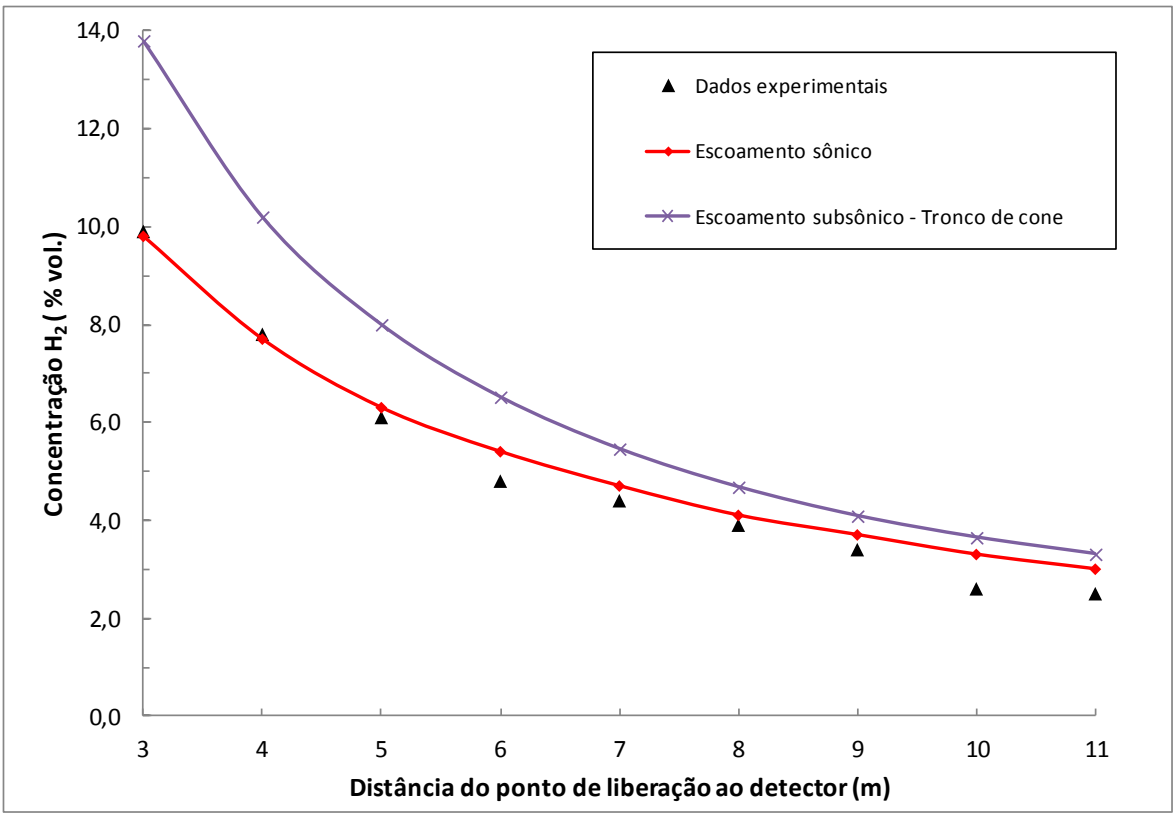


Figura 44: Concentração de H_2: Dados experimentais *versus* Simulação numérica.

Analisando-se o gráfico, pode-se perceber que o escoamento sônico apresentou resultados muito similares aos registrados pelos dados experimentais, mostrando que esta modelagem representa satisfatoriamente escoamentos de gases a altas pressões.

A simulação subsônica com tronco de cone, assim como observado nos Testes Modelo (caso 6), e independente da condição de contorno de entrada de gás adotada, vazão mássica ou velocidade, apresenta concentrações de H_2 superestimadas em relação às concentrações de H_2 do escoamento sônico e dos próprios dados experimentais.

Middha *et al*. (2009) obtiveram resultados semelhantes aos relatados neste trabalho quando compararam dados experimentais de vazamentos de H_2 a altas pressões a simulações utilizando a aproximação da *pseudo source* (tronco de cone), através do

programa de CFD FLACS. Desvios entre as observações e as previsões foram observados quando simularam experimentos conduzidos por Chaineaux (1999). Os experimentos envolviam liberações de H_2 de um tanque pressurizado a 200 bar, em um orifício de 0,5 mm. As concentrações previstas pelo programa FLACS foram em torno de 50% maiores que os valores medidos experimentalmente.

Concentrações superestimadas também foram obtidas na modelagem de um outro experimento com liberação a alta pressão, 160 bar, em orifício de 0,25 mm.

Middha *et al*. (2009) concluem que, principalmente em pequenos orifícios e pequenas vazões, valores superestimados de concentrações de jato podem ser obtidos. Uma das explicações seria pelo fato dos detalhes internos dos orifícios, não descritos nas simulações, serem muito mais importantes nos pequenos orifícios. Outra explicação, que inclusive já estaria sendo discutida com outros pesquisadores, seria exatamente o fato de que a simplificação da simulação através do uso da *pseudo source* teria limitações, principalmente nos casos de pequenos diâmetros.

Voltando aos Testes Modelo, pôde-se perceber que os resultados fornecidos pelos casos sônicos 4 e 5, ou seja, entrada de gás no domínio através de *source point* ou furo, respectivamente, foram semelhantes. No entanto, a convergência para o caso com *source point* foi muita mais rápida: 350 iterações e 2 horas, contra 3042 iterações e 15 horas. Como a validação contra os dados experimentais foi conduzida com o *source point* e os resultados, como observados acima, foram muito bons, conclui-se que, desde que um refinamento adequado da malha seja realizado na região da dispersão do gás, o *source point* pode ser usado como condição de contorno de entrada do gás no domínio de interesse, poupando tempo ao se evitar que o furo tenha de ser feito durante a etapa de confecção da geometria.

Conclui-se também que as modelagens sônicas reproduzem melhor o escoamento sônico de gás, do que o uso do tronco de cone e a simplificação para um escoamento subsônico, como proposto por diversos autores, como Middha *et al*. (2009) e Fleck (2008).

6.3. Estudo de Dispersão na Unidade de HDT

6.3.1. Teste de Independência de Malha

Na Tabela 12 são apresentadas as concentrações de H_2 para as malhas de A a D, nos pontos aleatórios criados, conforme explicado na seção 5.4.2. Pode-se perceber que praticamente não ocorreram alterações na concentração de H_2 entre as malhas C e D. Assim, concluiu-se que a malha C já não estava mais influenciando os resultados das simulações, sendo esta a malha adotada para todos os cenários de vazamento constantes na Tabela 9.

Tabela 12: Teste de independência de malhas: Concentração de H_2.

Coordenadas (m)			Concentração de H_2 (Fração volumétrica)			
X	**Y**	**Z**	**Malha A**	**Malha B**	**Malha C**	**Malha D**
28,8	41,6	11,5	0,020	0,017	0,010	0,010
31,9	38,3	5,4	0,008	0,006	0,004	0,004
26,2	48,2	10,6	0,017	0,005	0,016	0,015
26,0	42,4	18,8	0,014	0,008	0,014	0,014
31,7	33,5	14,2	0,005	0,008	0,005	0,004
30,5	34,5	3,6	0,008	0,013	0,011	0,011
32,6	50,1	3,2	0,008	0,014	0,009	0,009
21,3	45,5	8,2	0,004	0,001	0,004	0,005
26,0	52,1	3,5	0,002	0,009	0,010	0,009
24,3	39,1	24,8	0,008	0,010	0,014	0,013
22,1	38,3	19,0	0,008	0,005	0,007	0,008
26,9	37,1	11,5	0,003	0,008	0,008	0,008
25,6	32,1	21,8	0,003	0,002	0,005	0,006
24,3	43,1	4,7	0,001	0,009	0,006	0,006
32,6	55,2	0,3	0,006	0,066	0,009	0,010
23,2	34,4	31,0	0,003	0,008	0,010	0,009
17,1	33,3	27,8	0,002	0,000	0,005	0,007
18,6	29,5	30,9	0,003	0,003	0,009	0,009
18,5	29,8	35,6	0,003	0,001	0,005	0,005

6.3.2. Vazamento nos Compressores da Unidade de HDT

Os compressores de reposição de H_2, C-02A e C-02B, foram os pontos de vazamento para a realização do estudo de dispersão de gases na unidade de HDT.

Realizando as simulações listadas na Tabela 9, espera-se obter dados suficientes para a aplicação da metodologia proposta para alocação dos detectores de gás na unidade de processo.

Os resultados serão apresentados em função dos pontos de vazamento, separados pelas direções de vazamento e pelas direções de vento.

Serão apresentados os campos de escoamento do vento nas formas de linhas de corrente e vetores velocidade, sendo possível, portanto, visualizar os caminhos percorridos pela corrente de ar na unidade, assim como pontos de recirculações, caminhos preferenciais e regiões de estagnação de ar, que podem colocar em risco a integridade das instalações e das pessoas.

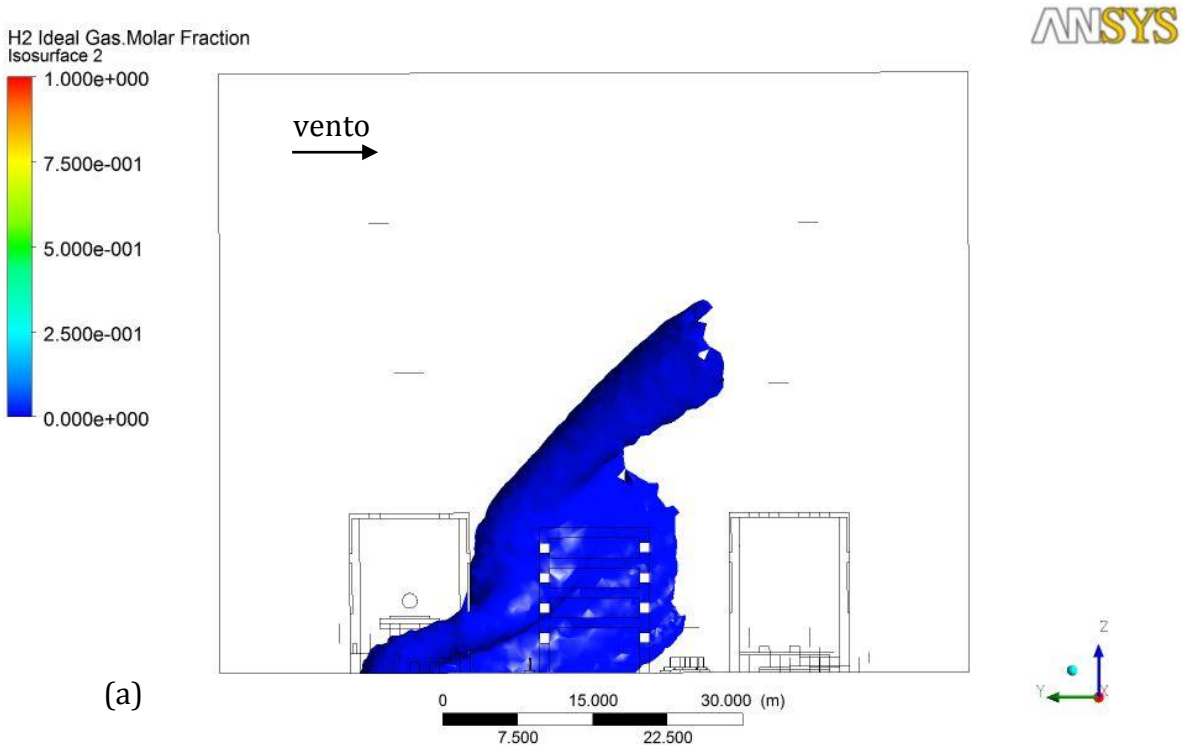
As dispersões de hidrogênio serão apresentadas sob duas formas de visualização. Na primeira maneira são mostradas as vistas superior e em corte das nuvens formadas após o vazamento, para possibilitar observarmos o espalhamento e a altura atingida pelas mesmas, respectivamente. Essas nuvens são apresentadas como isossuperfícies, na concentração de 20% do LII, ou seja, na fração volumétrica (ou molar) de 0,008, uma vez que o LII (100%) do H_2 é de 4%. É importante salientar, neste momento, que os detectores comerciais são capazes de detectar concentrações de 0 a 100% do LII do gás.

A segunda forma de apresentação é constituída por planos que possuem superfícies de contorno com variação de coloração em função da fração volumétrica do gás, ou seja, cortes horizontais, em Z, nos pontos de origem dos vazamentos, para visualizar as áreas cuja concentração de gás encontra-se entre 0% e 100% do LII. Na região de 100% do LII, qualquer fonte de ignição é capaz de inflamar a mistura Ar/H_2.

Segundo HSL (2005), volumes de nuvens gasosas, que têm concentrações médias de 50% do LII, são considerados desprezíveis, quando são menores que 0,1 m^3. No entanto, no presente trabalho, esta afirmação não foi considerada, pois, como já mencionado, o diâmetro de furo utilizado para o cálculo da vazão mássica de gás vazado é puramente estatístico, ou seja, o volume da nuvem poderia ser desprezível para vazamentos daquele tamanho, mas não ser para vazamentos maiores, passíveis de ocorrer, e que formariam, consequentemente, nuvens maiores.

Antes dos resultados das simulações serem apresentados, mostramos na Figura 45 uma isossuperfície de 20% do LII do H_2 (0,008 de fração volumétrica) em (a) uma simulação com

escoamento sônico e (b) outra com escoamento subsônico, ambas com entrada de gás através do *source point*, para que possa ser observada a diferença nos perfis das nuvens, evidenciando, mais uma vez, que resultados bastante distintos são encontrados quando da tentativa de reproduzir um escoamento sônico de gás.



(a)

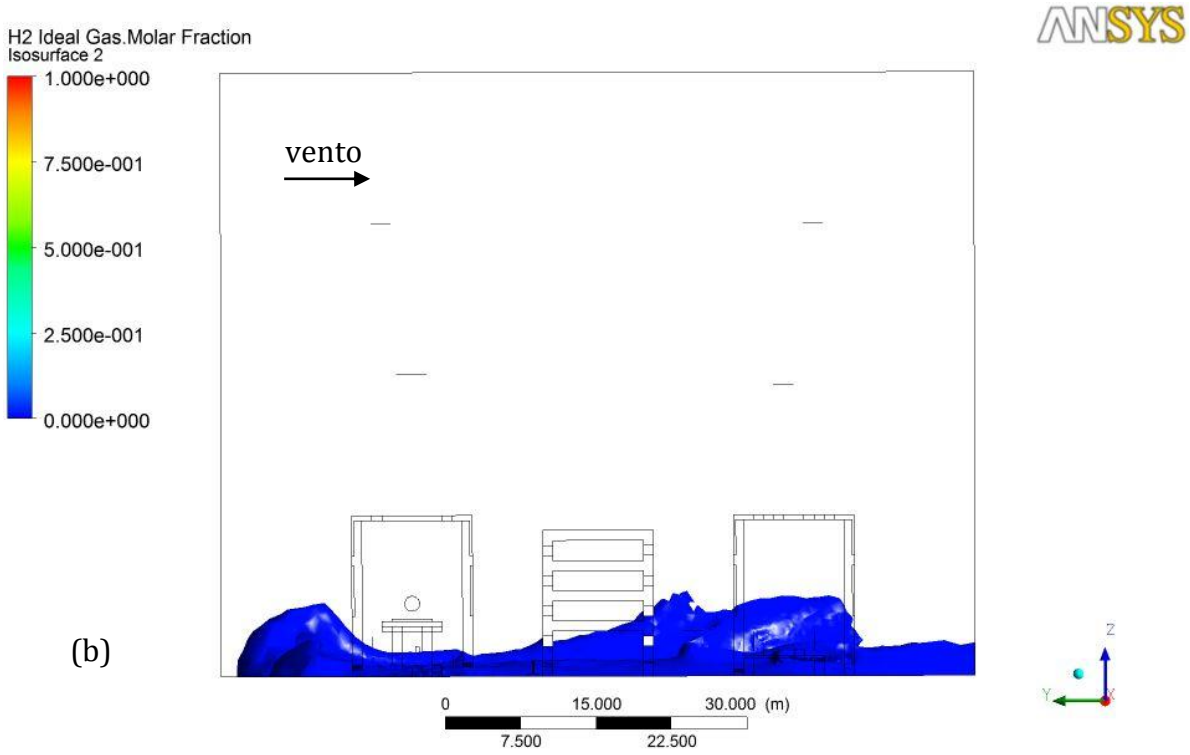


Figura 45: Dispersão de H_2 do compressor C-02A, direção de vazamento para baixo, vento norte. Isosuperfície com fração volumétrica de 0,008: (a) escoamento sônico; (b) escoamento subsônico.

6.3.2.1. Vento Norte

O campo de escoamento do vento na direção norte, com velocidade de 0,9246 m/s, ao longo do domínio da unidade é apresentado na Figura 46, nas formas de (a) linhas de corrente e (b) vetores velocidade, já influenciado pelo vazamento de gás no C-02A.

A Figura 47 e Figura 48 mostram, respectivamente, a isossuperfície de 20% do LII, (a) em vista e (b) em corte, e o contorno horizontal de 0% a 100% (0,04 de fração volumétrica) do LII, formados pelo escoamento do gás proveniente do compressor C-02A, com direção de vazamento para baixo.

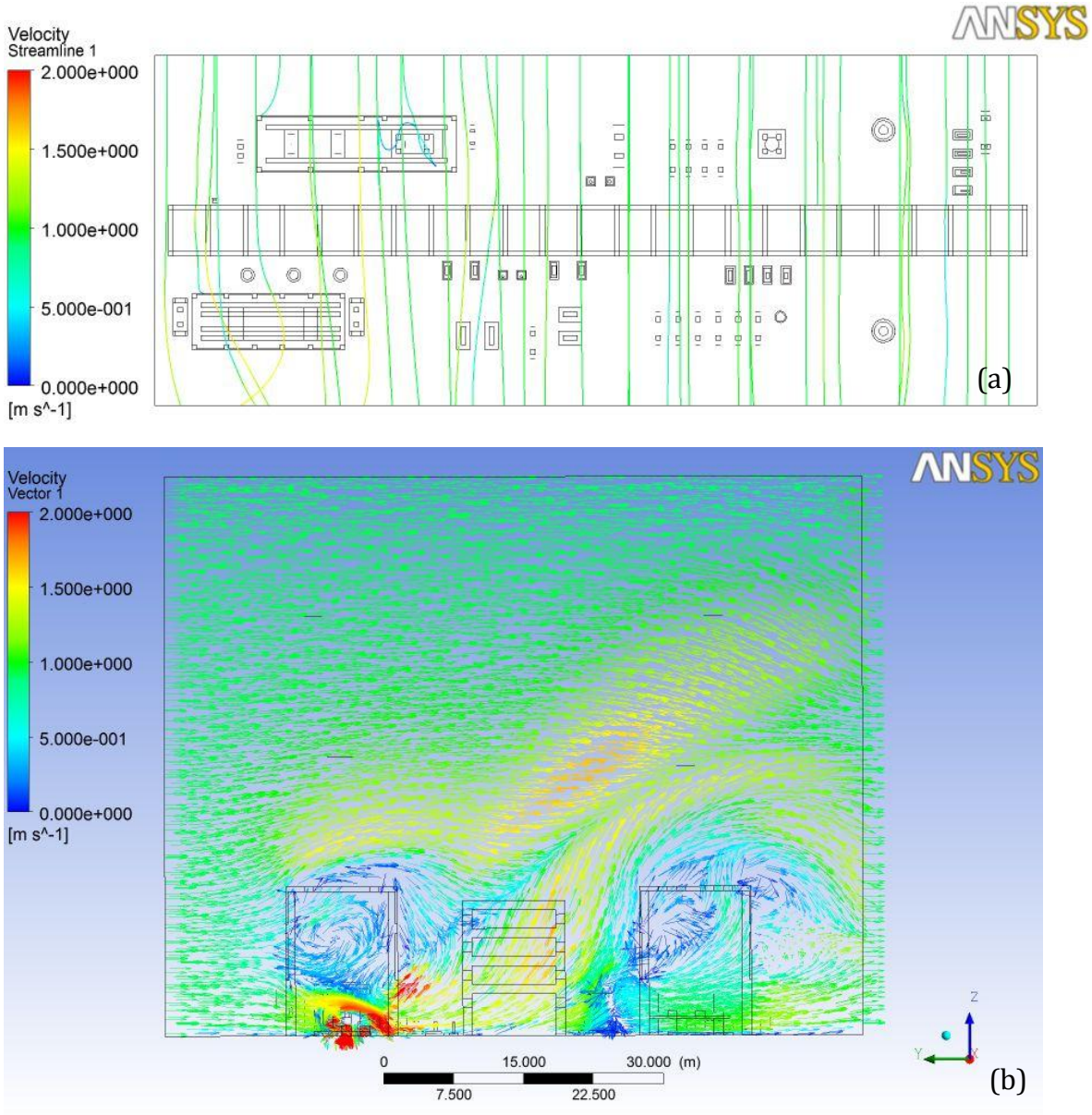


Figura 46: Campo de escoamento do vento na direção norte nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano YZ).

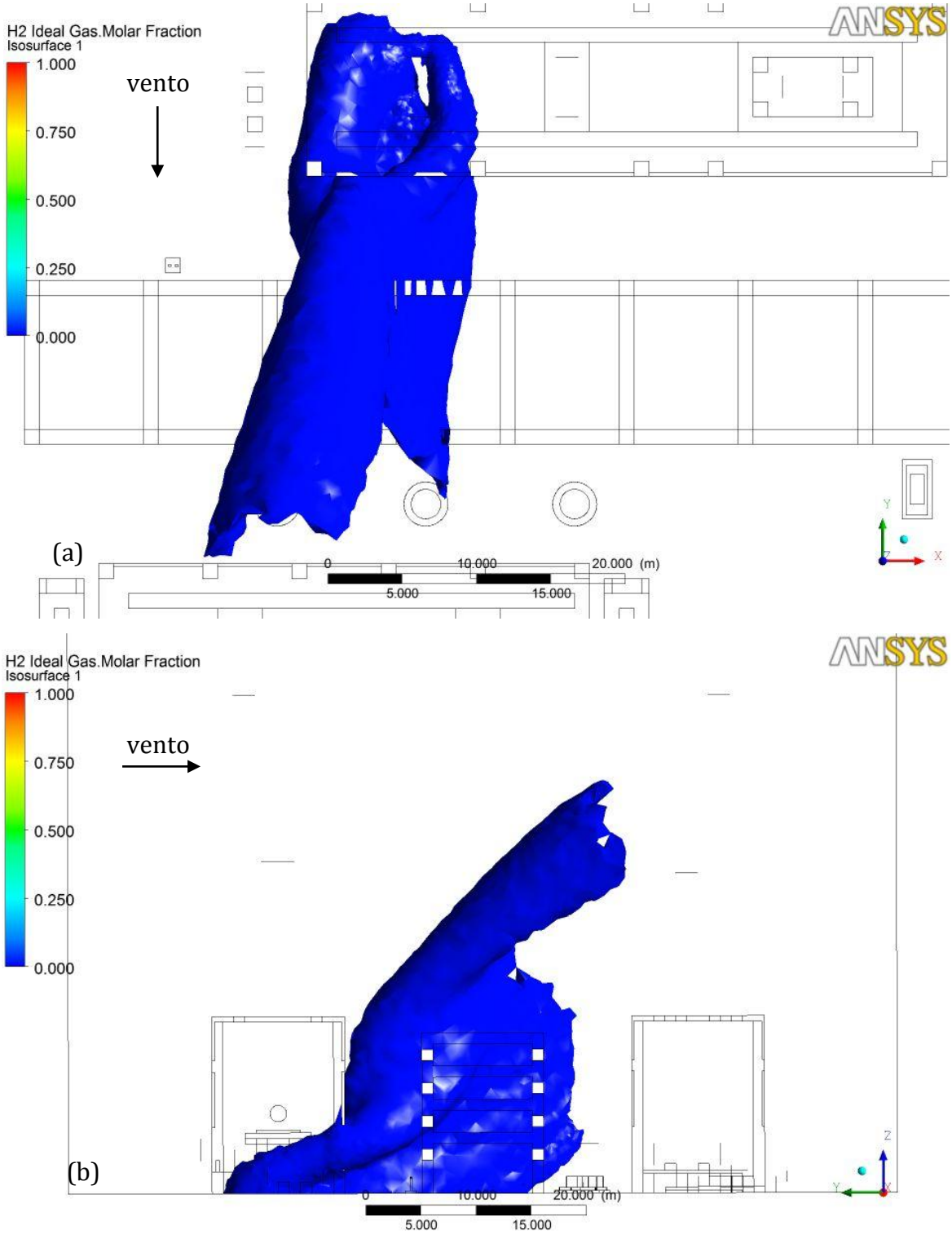


Figura 47: Cenário 1: Vento norte, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

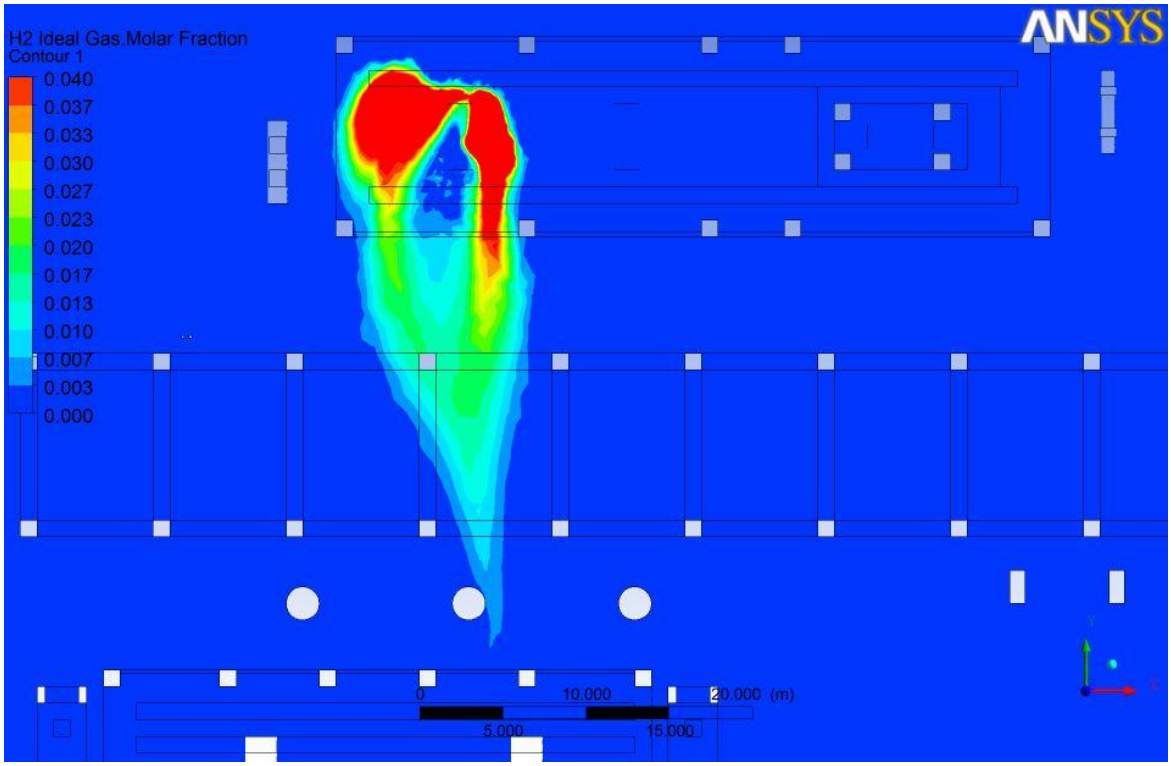


Figura 48: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento norte (cenário 1).

Como já comentado, na região de 100% do LII, qualquer fonte de ignição será capaz de inflamar a mistura Ar/H_2, pois a mesma se encontra nas condições estequiométricas ideais para tal. Um bom projeto de classificação de áreas é de fundamental importância, pois nessas regiões não pode haver qualquer equipamento elétrico que não seja apropriado para atmosferas explosivas. Além disso, fica clara também a importância dos detectores estarem alocados de forma que sejam atuados o mais rapidamente possível, tentando, inclusive, evitar que a mistura explosiva chegue a ser formada.

Assim como foi feito para o cenário 1 acima, as Figuras 49 a 54 apresentam as nuvens e os contornos formados nas simulações, respectivamente, dos cenários 2, 3 e 4.

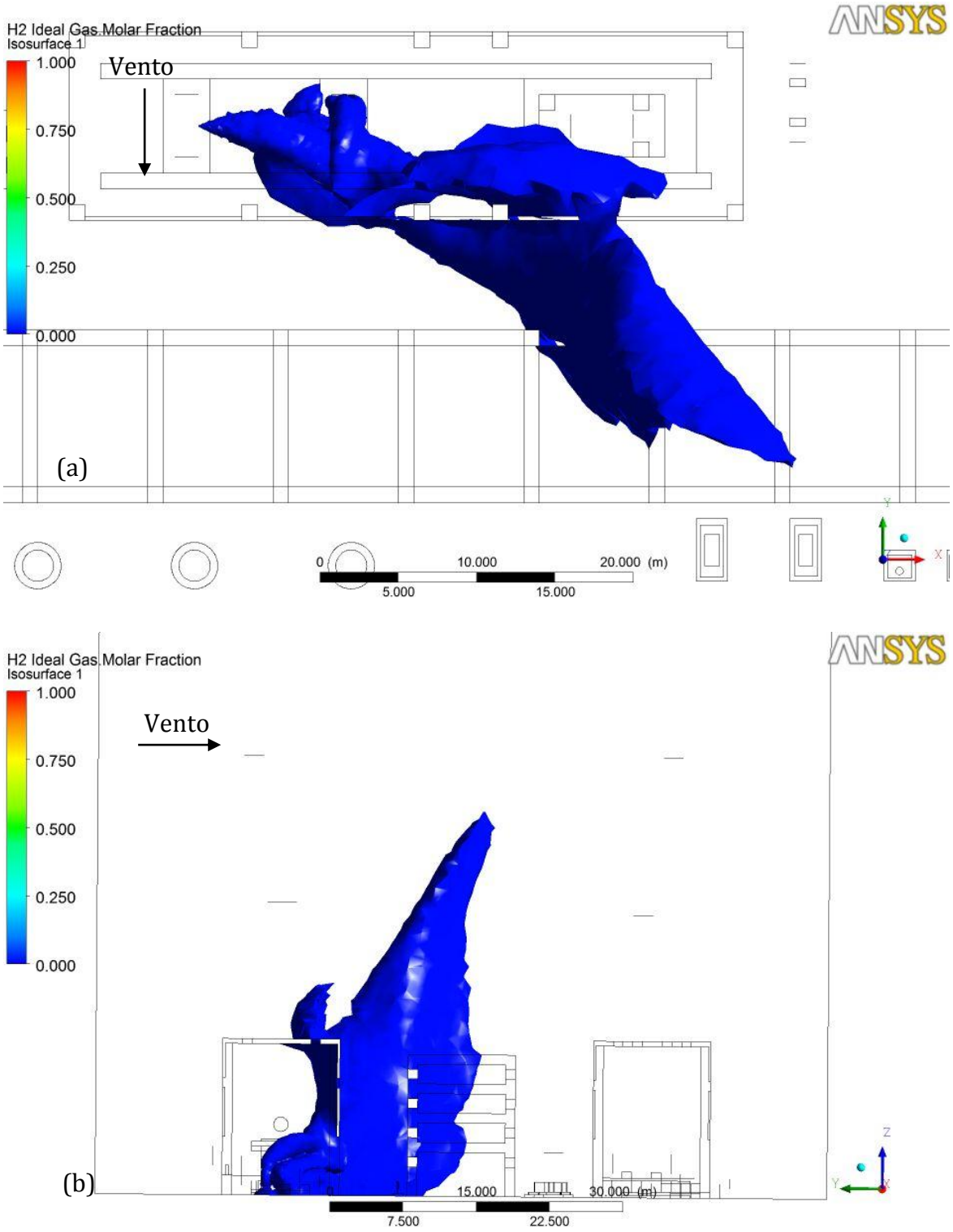


Figura 49: Cenário 2: Vento norte, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

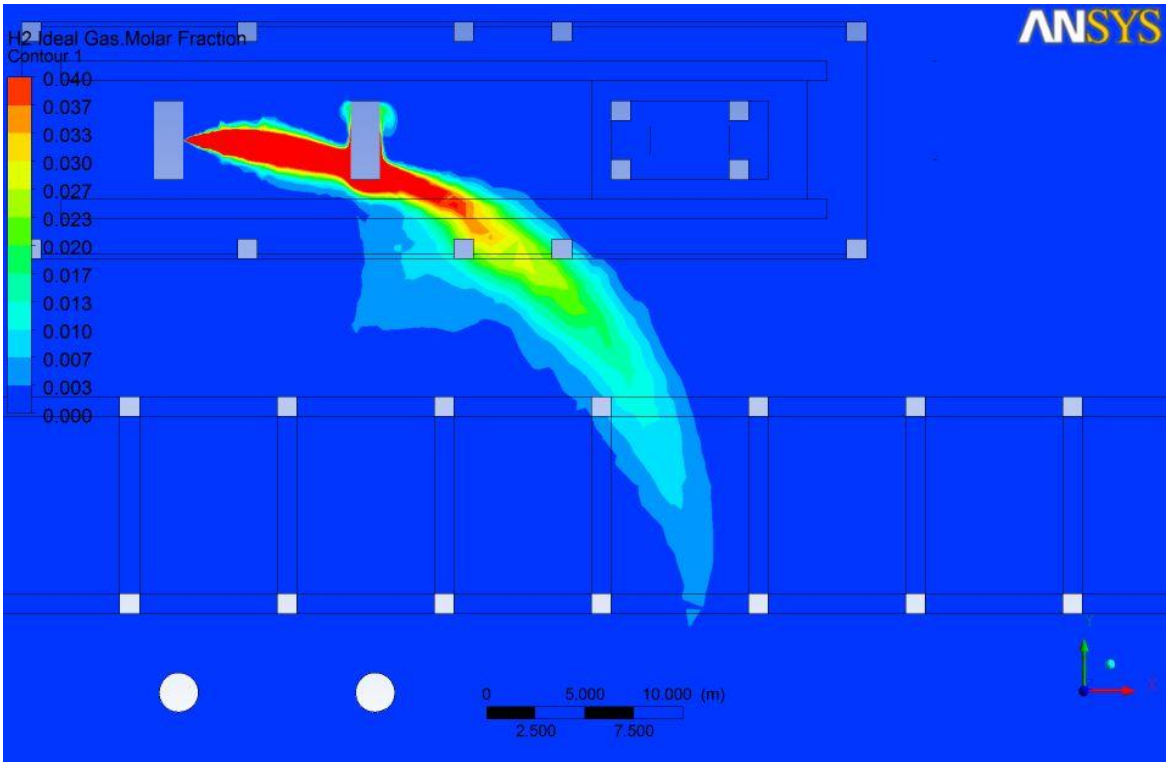
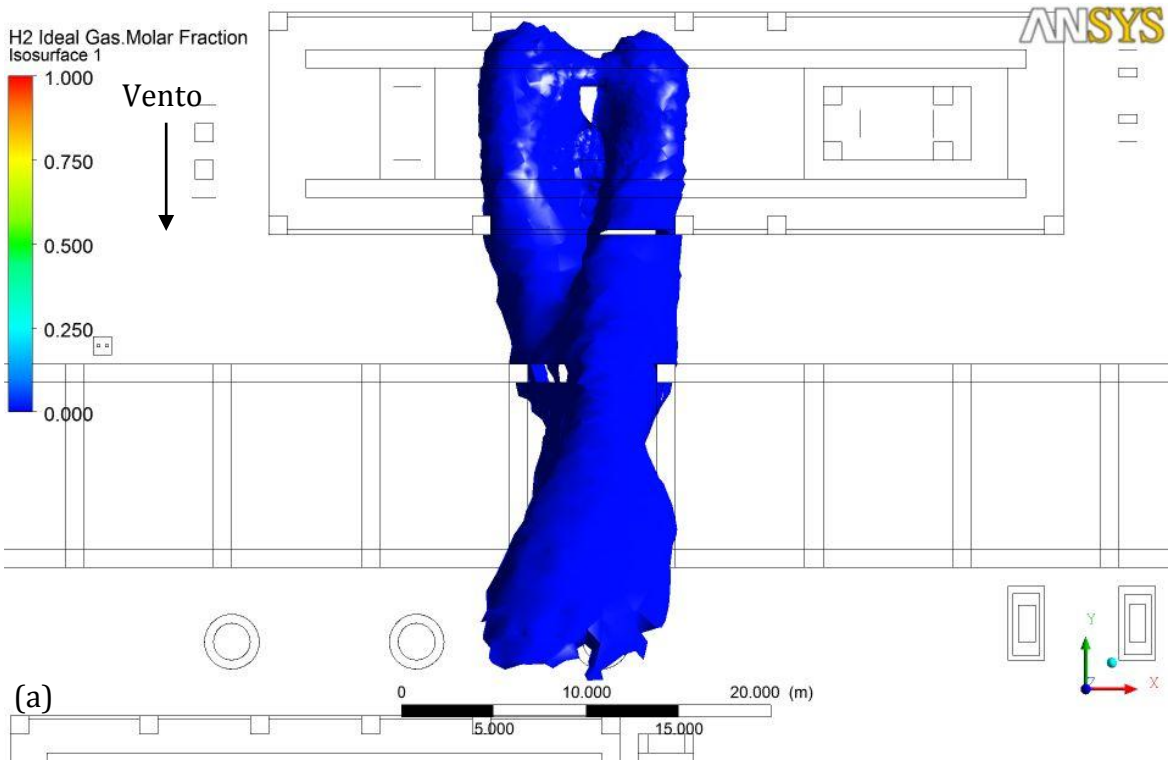


Figura 50: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento norte (cenário 2).



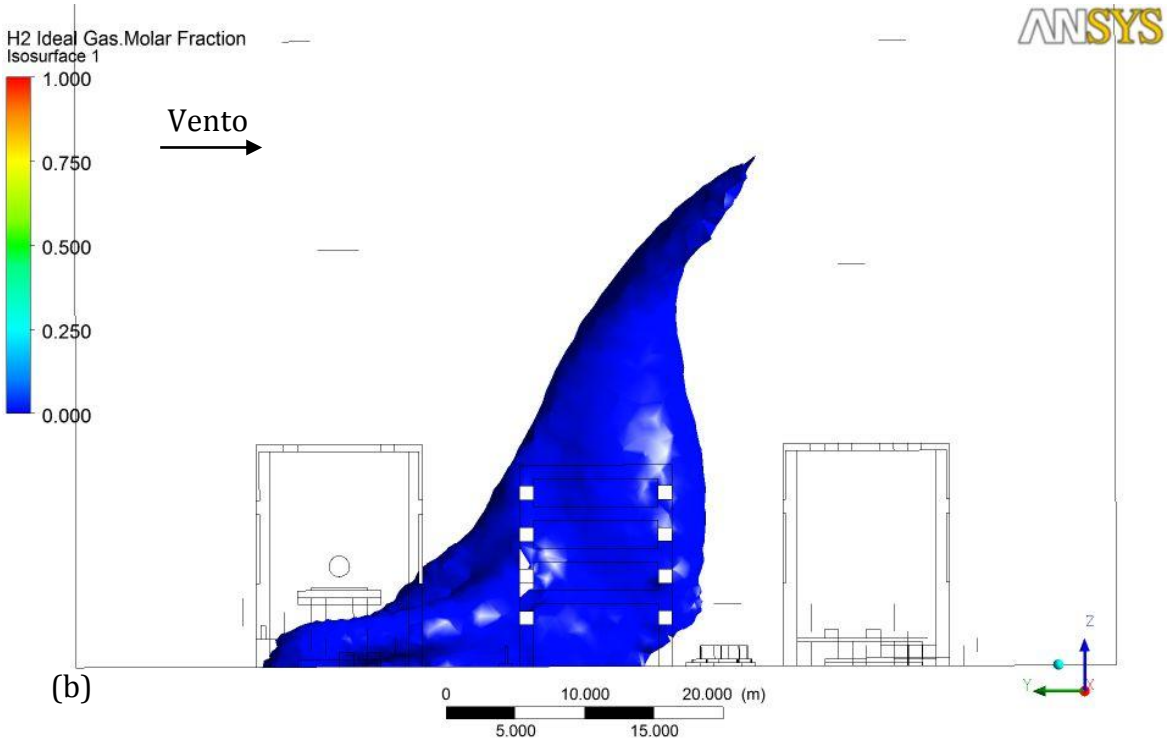


Figura 51: Cenário 3: Vento norte, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

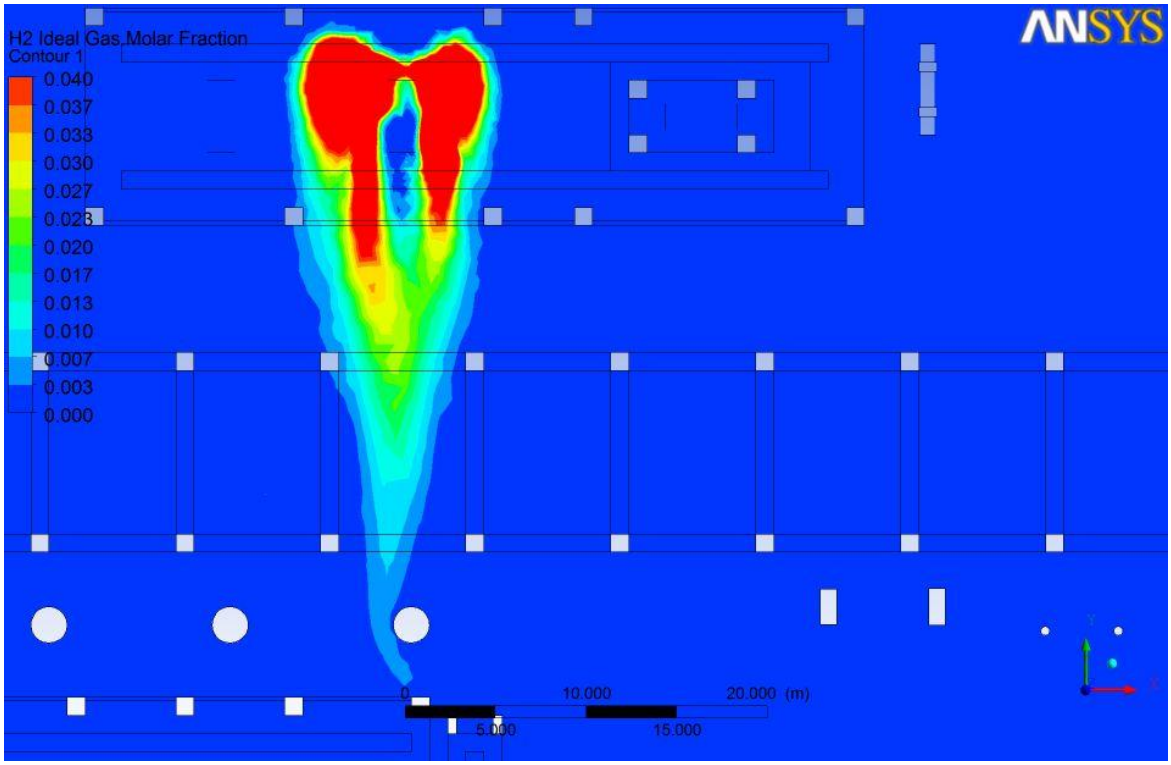


Figura 52: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento norte (cenário 3).

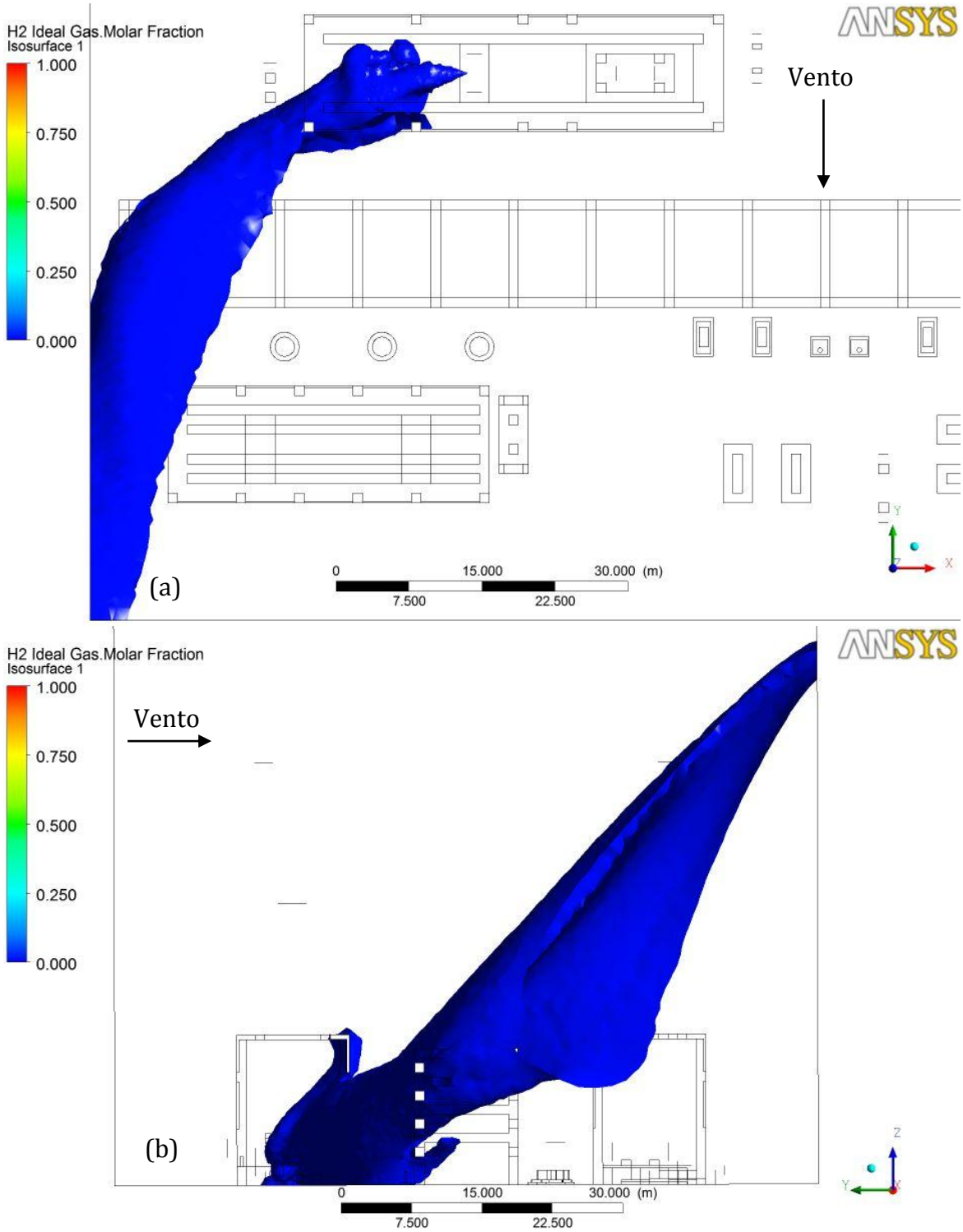


Figura 53: Cenário 4: Vento norte, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

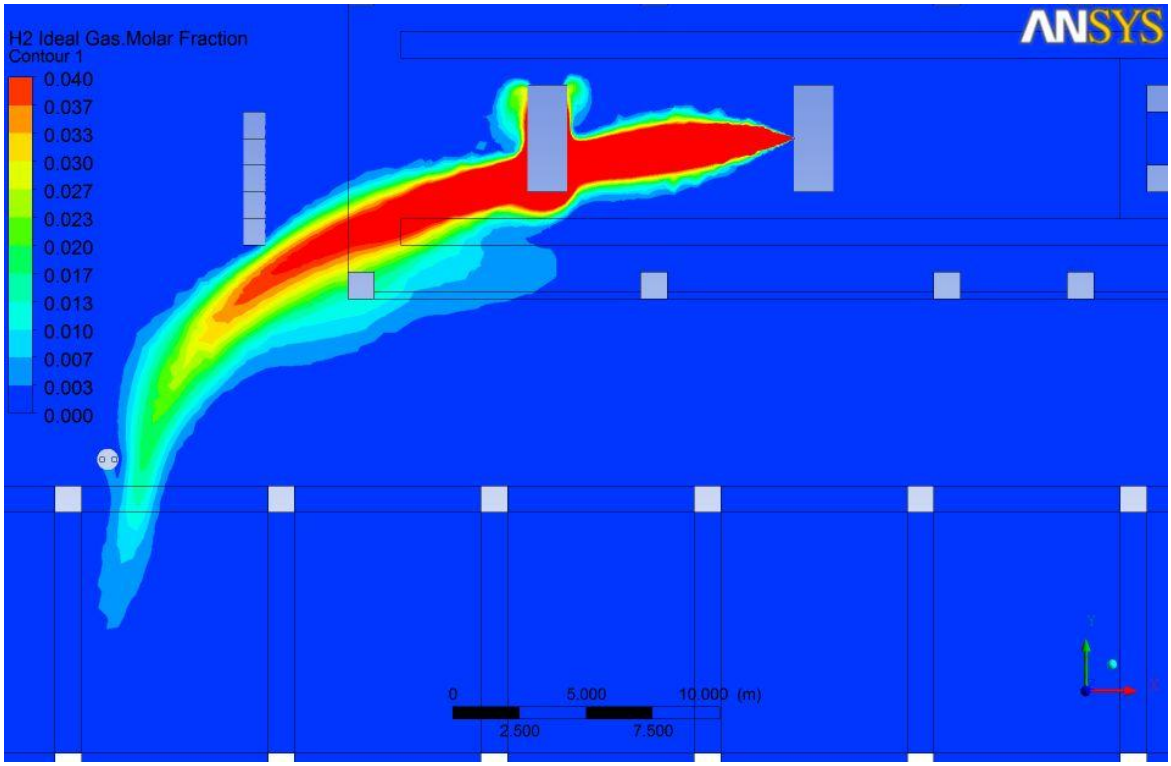


Figura 54: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento norte (cenário 4).

No Anexo, são apresentados os campos de velocidades para as outras 7 direções de vento, todos influenciados pelo vazamento no compressor C-02A, bem como os perfis das nuvens e os contornos de concentração de H_2 para os outros 28 cenários.

Analisando-se as simulações de dispersão de H_2 na unidade de HDT ficou claro que todas as nuvens geradas apresentaram riscos para a segurança da unidade, não podendo, portanto, ser desprezadas na etapa de avaliação do posicionamento de detectores. Isto pode ser verificado quando se observam as figuras que apresentam as nuvens de H_2 em isossuperfícies ou contornos de concentração de H_2 (0 a 100% do LII) no plano XY, onde, nestas últimas, as extensões de concentração a 100% do LII (região em vermelho nas figuras) não são desprezíveis, atingindo, invariavelmente, mais de 10 m de comprimento.

Além disso, as liberações para o chão da unidade são as mais perigosas, pois dispersam menos as nuvens, sendo facilmente constatado quando comparamos, novamente, os contornos de concentração de H_2 em 100% do LII, pois além de serem extensos, são mais largos do que os de escoamentos para os lados, aumentando ainda mais os riscos (Figura 64 x Figura 66, ou Figura 77 x Figura 79, por exemplo).

Segundo HSL (2005), escoamentos que se cruzam (direção de vento x direção de vazamento) reduzem o tamanho da pluma (nuvem), ao passo que escoamentos co-correntes geram maiores volumes de nuvens gasosas. No entanto, pela análise das nuvens formadas pelo cenário 10 (direção de vento leste (ou seja, vento vem do leste) x direção de vazamento para leste) ou cenário 16 (direção de vento oeste x direção de vazamento oeste), pôde-se concluir que escoamentos contra-correntes também formam nuvens de volume considerável. Este comportamento também foi observado por Fleck (2008).

Outro ponto muito importante é como o alto momento da liberação de H_2 faz diferença e influencia no perfil das nuvens, sendo no ponto de vazamento e nas regiões próximas mais relevantes que a velocidade do vento e a densidade do gás vazado. Somente distante dessas regiões, quando a velocidade de dispersão do hidrogênio é baixa, que a velocidade do vento passa a influenciar no formato e na direção da nuvem, por exemplo, nos cenários 24 (Figuras 105 e 106) e 26 (Figuras 110 e 111).

6.4. Posicionamento dos Detectores de Gás

Como apresentado na Figura 31 e Figura 32, a malha proposta inicialmente com os possíveis pontos de detecção era composta de 855 pontos equidistantes, espaçados de 5 x 5m. Porém, após a análise dos 32 cenários pelo programa computacional desenvolvido para a avaliação do posicionamento dos detectores, somente 6 pontos (detectores) precisam ser utilizados para a detecção de todos os cenários (Tabela 13).

Tabela 13: Cenário de vazamento x Detector atuado por este cenário.

Cenário	Detector atuado*	Cenário	Detector atuado*
1	2, 4	17	2, 4
2	3	18	6
3	1	19	1
4	4	20	4
5	2	21	1, 2, 4, 5, 6
6	1, 5	22	3, 5
7	1	23	3, 5, 6
8	1	24	2, 4
9	2, 4	25	2
10	1, 6	26	1, 5
11	1, 4	27	1
12	2	28	1
13	1, 2, 3, 4, 5, 6	29	1, 2
14	5	30	1, 5
15	3	31	3, 5
16	1, 2	32	1, 2, 5

* a caracterização dos detectores se encontra na Tabela 14.

Analisando a Tabela 13, verifica-se que 53% (17/32) dos cenários são cobertos por, pelo menos, 2 detectores, o que é muito positivo, pois aumenta a confiabilidade do sistema. Isto significa que, nestes casos, se um detector falhar, ao menos um outro detector estará apto a fazer a detecção.

Por outro lado, o detector de número 1 é o responsável pela detecção do maior número de cenários, 16 ao todo. Além disso, ele é o único a detectar 6 dos 15 casos, 40%, que são cobertos por apenas um detector. Desta forma, numa situação real, seria conveniente, visando aumentar a confiabilidade do sistema de detecção, que um outro detector fosse instalado próximo ao detector de número 1. Se esta tática fosse adotada, ao invés de 53%, 72% dos cenários estariam cobertos por, pelo menos, dois detectores.

Como todos os cenários foram detectados automaticamente pelo programa, não será necessária a alocação de qualquer detector de forma manual, com vistas a cobrir cenários que não tivessem sidos detectados.

A Figura 55 apresenta a posição dos detectores na planta, (a) em vista superior e (b) em corte, respectivamente.

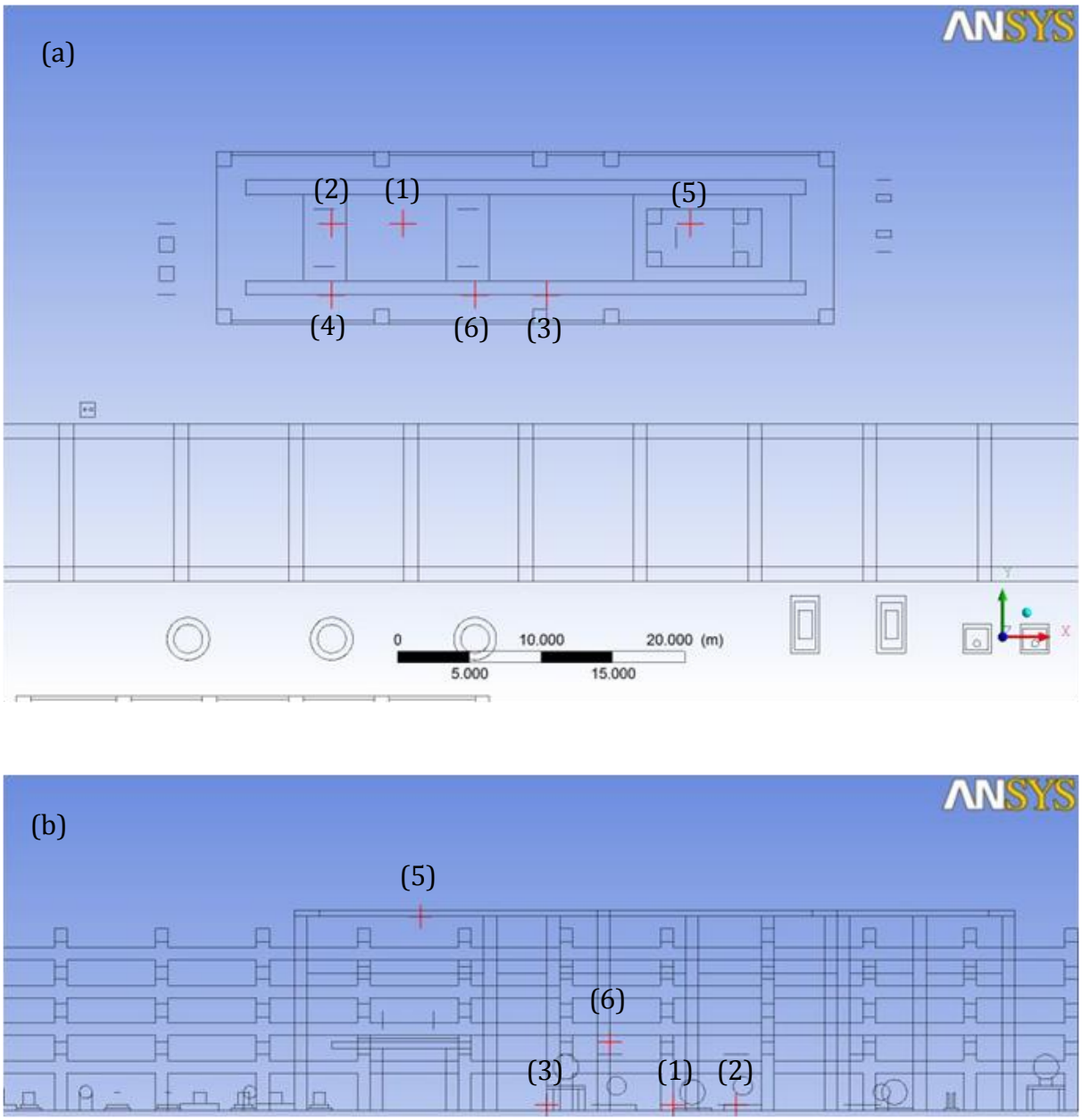


Figura 55: Localização dos detectores na unidade: (a) Vista superior; (b) Vista em corte (Sul).

Em um projeto real, seria necessário, neste momento, verificar se nesses 6 pontos de detecção seria possível alocar os detectores, ou seja, se estes pontos não estão em áreas de manutenção, rotas de fuga, ou outros locais que inviabilizem a sua fixação. Isto seria feito de maneira simples com o auxílio da maquete 3D da unidade. Esta tarefa não foi realizada no presente trabalho, pois os detectores não serão fisicamente instalados na planta.

Podemos perceber que os 6 pontos de detecção necessários para detectar os 32 cenários estão dentro da casa de compressores onde estão situados os compressores que

representaram as fontes de vazamento. Isto indica que a proposta inicial de não gerar uma matriz de pontos por toda a unidade é totalmente aceitável.

Outra forma de apresentação dos detectores é proposta na Tabela 14. Nesta são apresentadas as coordenadas de cada detector, bem como a quantidade de cenários que cada um foi capaz de detectar e os casos detectados por eles.

Tabela 14: Coordenada dos detectores e cenários detectados.

Detector	Coordenada (X, Y, Z) (m)			Número de cenários detectados	Cenários detectados
1	35	57	0,5	16	3, 6, 7, 8, 10, 11, 13, 16, 19, 21, 26, 27, 28, 29, 30, 32
2	30	57	0,5	12	1, 5, 9, 12, 13, 16, 17, 21, 24, 25, 29, 32
3	45	52	0,5	6	2, 13, 15, 22, 23, 31
4	30	52	0,5	9	1, 4, 9, 11, 13, 17, 20, 21, 24
5	55	57	15,5	10	6, 13, 14, 21, 22, 23, 26, 30, 31, 32
6	40	52	5,5	5	10, 13, 18, 21, 23

Pode ser verificado que nenhum dos detectores poderia ser excluído da malha de detecção sem prejuízo à capacidade de detecção de todas as nuvens, ou seja, não existe nenhuma situação em que os cenários cobertos por um determinado detector fossem todos eles cobertos pelos outros 5 detectores.

O cenário 19, por exemplo, só é coberto pelo detector número 1; assim como, o cenário 12 pelo detector 2; o cenário 2 pelo detector 3; o cenário 20 pelo detector 4; o cenário 14 pelo detector 5; e o cenário 18 pelo detector 6.

Como exemplo, as Figuras 56 a 61 comprovam que o detector de número 6 é capaz de detectar as nuvens de H_2 geradas pelas simulações dos cenários 10, 13, 18, 21 e 23, conforme informado na Tabela 14.

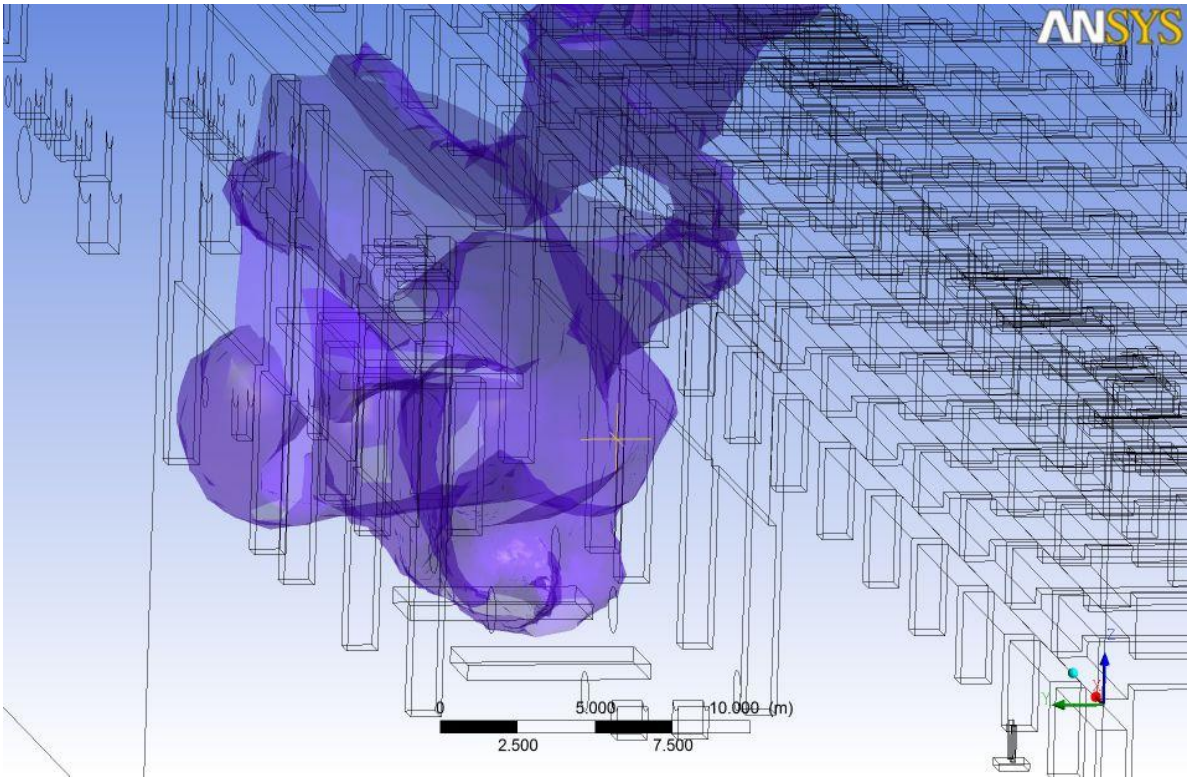


Figura 56: Cenário 10 (vento leste – C-02A – direção leste) coberto pelo detector 6.

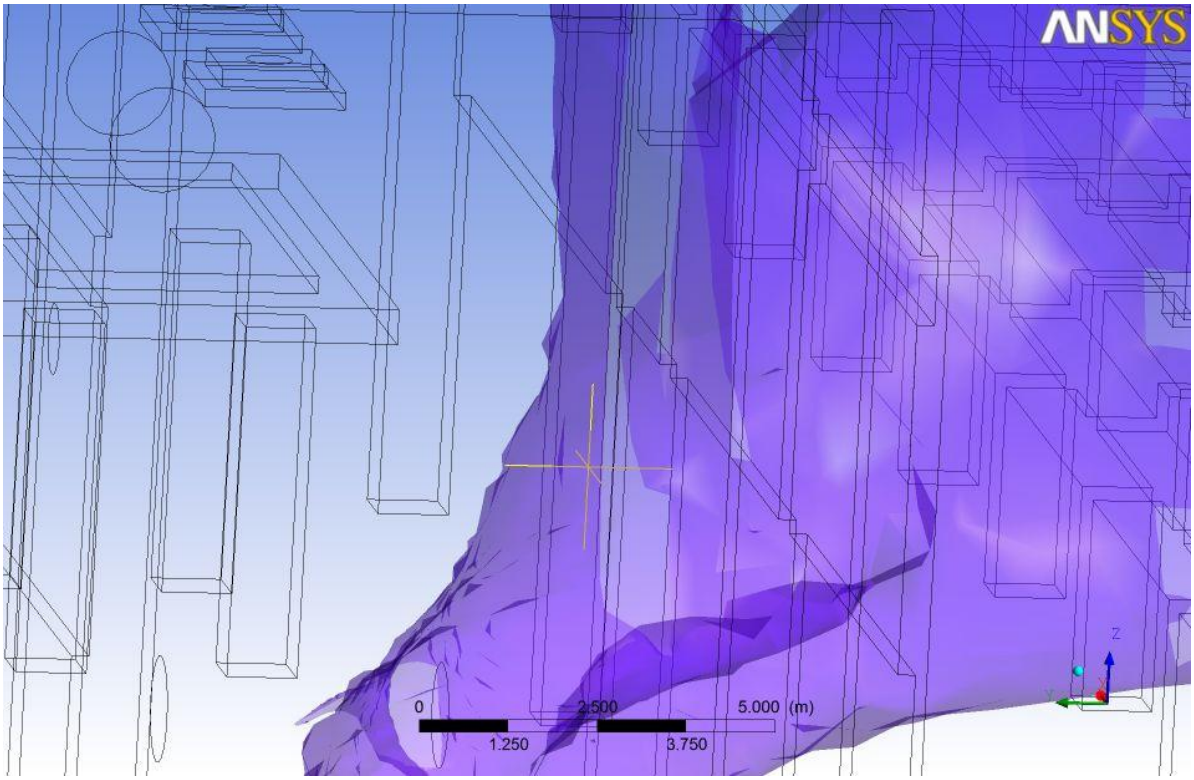


Figura 57: Cenário 18 (vento nordeste – C-02A – direção leste) coberto pelo detector 6.

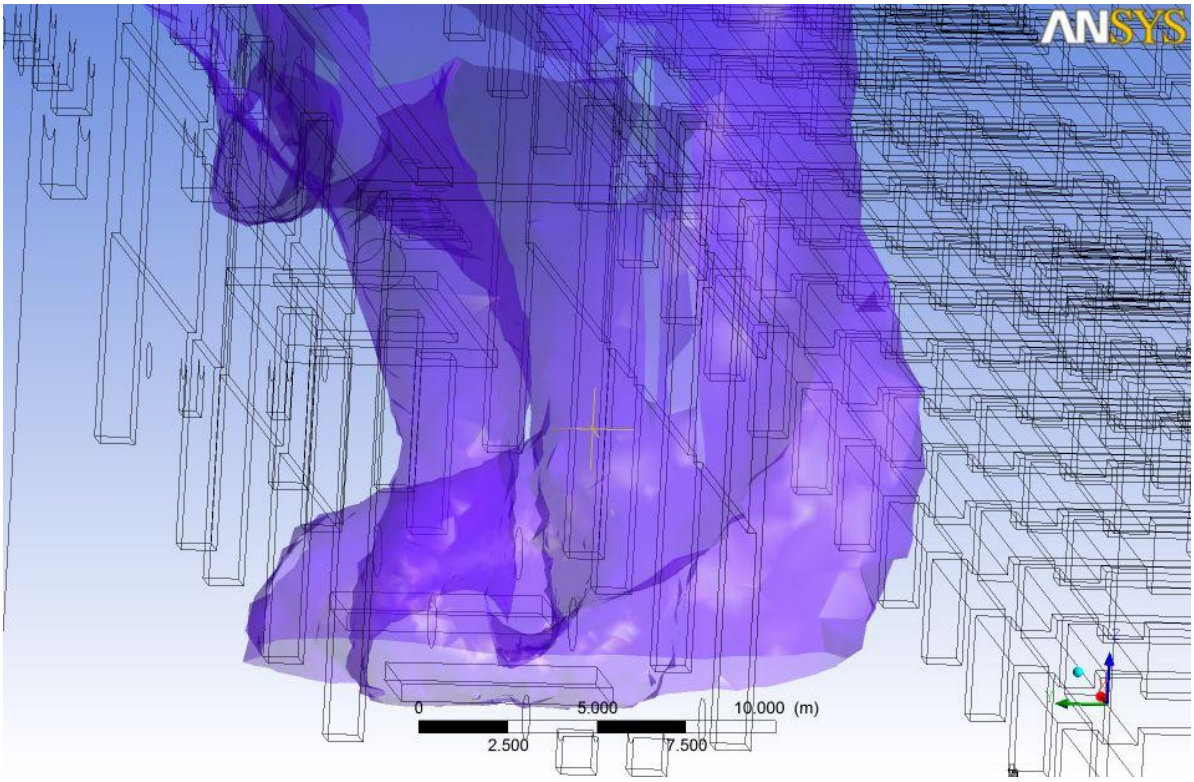


Figura 58: Cenário 21 (vento noroeste – C-02A – direção baixo) coberto pelo detector 6.

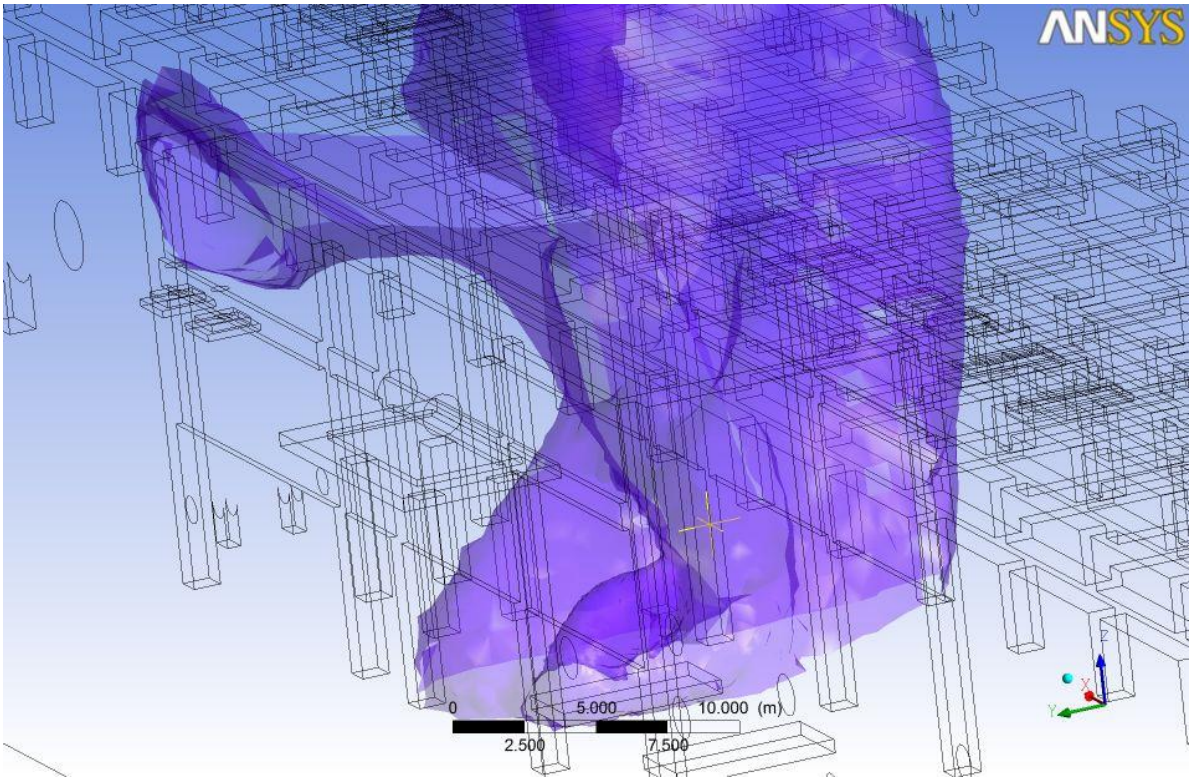


Figura 59: Cenário 23 (vento noroeste – C-02B – direção baixo) coberto pelo detector 6.

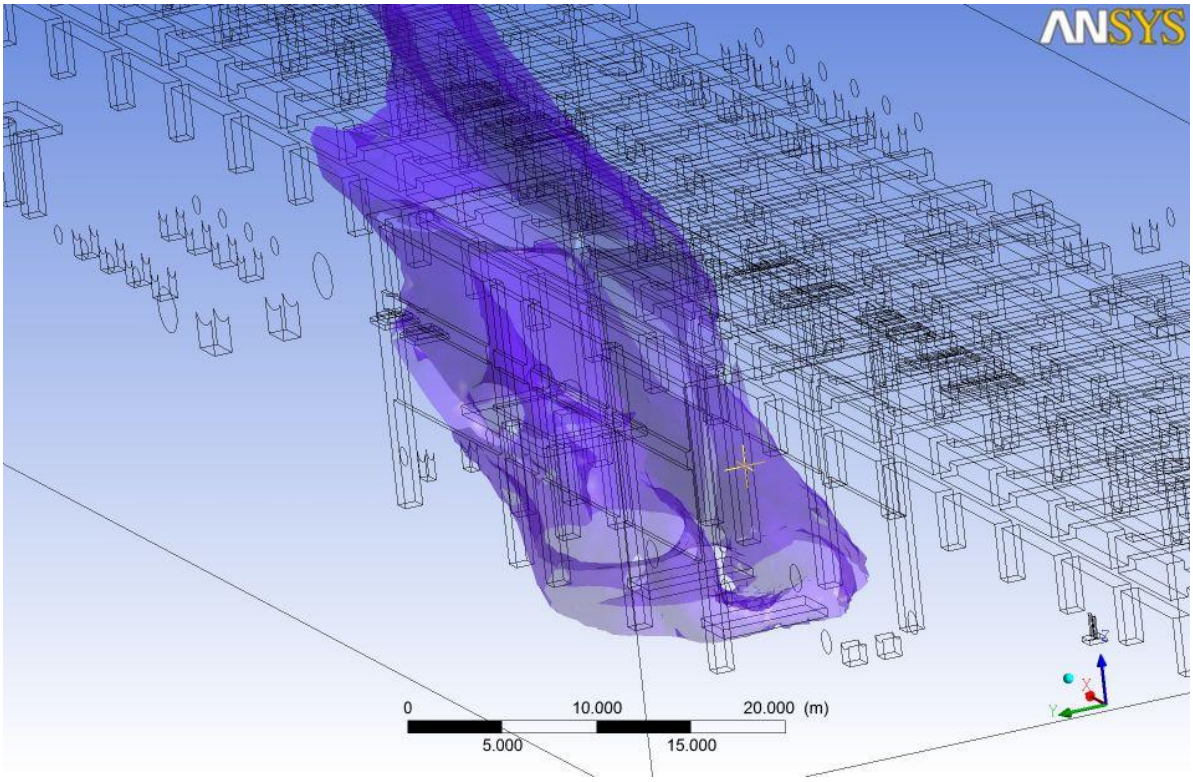


Figura 60: Cenário 13 (vento oeste – C-02A – direção baixo) coberto pelo detector 6.

Como forma de verificar se teríamos respostas diferentes ao adotar o espaçamento de 3 x 3 m, ao invés do espaçamento de 5 x 5 m, na Matriz de Busca Inicial, uma nova análise foi realizada com o programa computacional para avaliação do posicionamento de detectores.

Da mesma forma que na simulação usando espaçamento de 5 x 5 m, todos os 32 cenários foram detectados automaticamente pelo programa, não sendo necessária a alocação manual de nenhum detector. Além disso, foram necessários os mesmos 6 detectores para cobertura de todos os cenários, porém, em diferentes coordenadas (Figura 61).

Na localização dos detectores com a malha inicial de 3 x 3 m percebeu-se que estes ficaram mais próximos dos pontos de vazamento do que na malha 5 x 5, sendo, portanto, mais susceptíveis à direção do vazamento, isto é, como não foram feitas simulações para todas as possíveis direções de vazamento, pode ser que, pela proximidade do detector à fonte de vazamento, ele não seja atuado caso o vazamento se dê em uma outra direção.

Por este motivo adotou-se a malha 5 x 5 m como a malha ideal para o presente trabalho, e os pontos de detecção gerados pela mesma como sendo a localização final dos

detectores. Concluiu-se, então, que a tarefa de avaliação do posicionamento dos detectores estava completa e o trabalho finalizado.

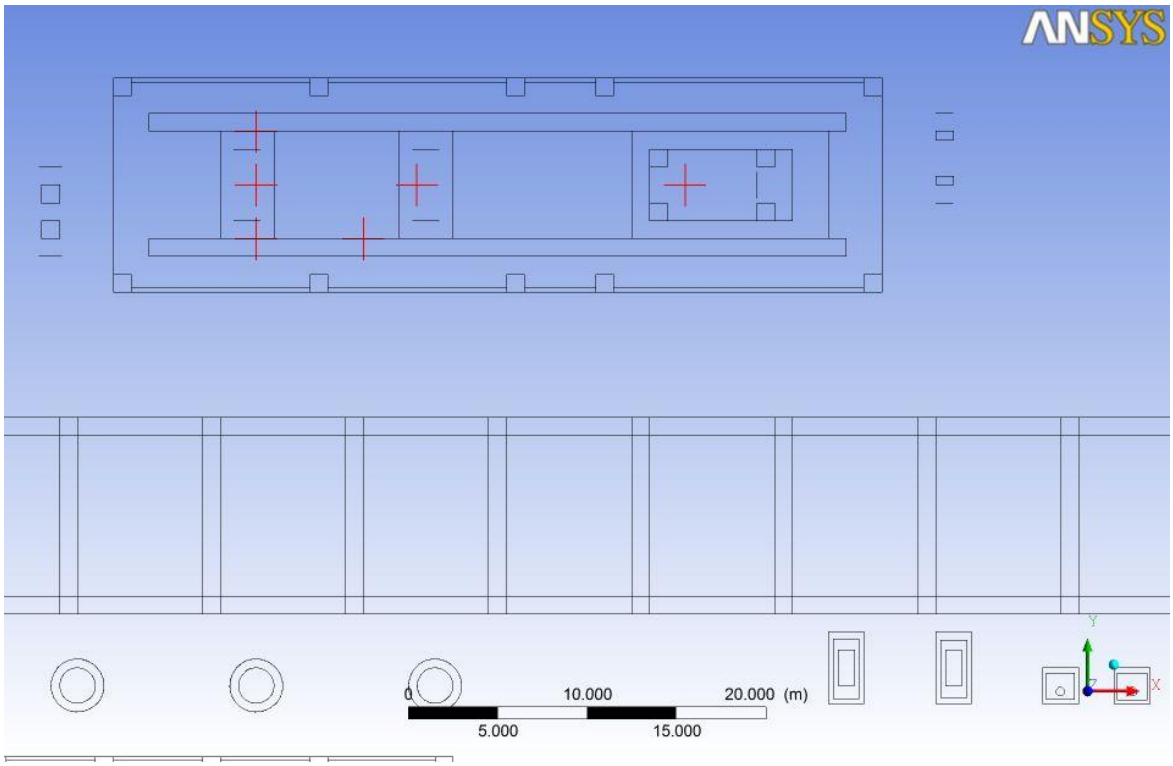


Figura 61: Posição dos detectores para o caso da Malha de Busca Inicial ter espaçamento de 3 x 3 m.

Cabe salientar ainda que mais pontos de vazamento gerariam, obviamente, mais simulações e mais plumas gasosas, e o processo de avaliação do posicionamento dos detectores poderia ser mais completo. Na consideração de mais cenários, a capacidade de um detector detectar diversas nuvens é muito mais provável, ou seja, dificilmente existiriam detectores na planta que fossem responsáveis pela detecção de somente uma nuvem ou de um número pequeno de nuvens. Em outras palavras, isso significa dizer que se fossem realizadas, por exemplo, 64 simulações, ao invés das 32 do presente trabalho, o aumento do número de detectores não seria proporcional, isto é, certamente o número ótimo seria inferior a 12 detectores.

7. CONCLUSÕES

Os resultados obtidos nos Testes Modelo evidenciaram que simulações considerando regime de escoamento sônico apresentam resultados bastante diferentes daqueles encontrados quando o regime é subsônico, tanto em termos de velocidades, quanto em concentrações no ambiente do gás vazado.

Ainda com base nos Testes Modelo, pôde-se concluir que, nas simulações com escoamento sônico (casos 4 e 5), a convergência para o caso com *source point* foi muita mais rápida que com o furo, o que facilita a confecção da geometria.

Os casos modelados como sônicos, 4 e 5, conseguiram captar as ondas de choque que realmente ocorrem numa liberação sônica real de gás para a atmosfera, e, consequentemente, as velocidades encontradas nas simulações (Figura 33 e Figura 34) são muito mais condizentes com os dados de literatura, o que implica dizer que os perfis de concentração obtidos para os casos sônicos retratam melhor o caso real do que os perfis de concentração obtidos nos escoamentos subsônicos.

Na validação das conclusões acima, obtida através da comparação com dados experimentais de vazamento de hidrogênio a altas pressões, observou-se que a modelagem sônica apresentou resultados bastante similares aos encontrados nestes experimentos (Figura 44). Por outro lado, as concentrações de H_2 obtidas com a simplificação para escoamento subsônico, através da técnica do tronco de cone (ou *pseudo source*), largamente citada na literatura, foram maiores do que as concentrações experimentais. Consequentemente, contrariando os resultados ou sugestões de HSL (2005), Fleck (2008) e outros estudiosos, conclui-se, através dos resultados das simulações apresentadas, que a modelagem sônica é a que melhor descreve um escoamento real de gás a altas pressões, sendo, portanto, a mais indicada para estudos de dispersão de gases quando os mesmos estiverem sendo processados em condições críticas.

Na etapa de avaliação do posicionamento dos detectores, o programa desenvolvido para esta tarefa atendeu perfeitamente aos seus objetivos, visto que com um número relativamente pequeno de detectores foi possível capturar todas as nuvens geradas nos 32 cenários de vazamento.

Desta Forma, o uso da fluidodinâmica computacional, associada a uma rotina computacional capaz de realizar a avaliação do posicionamento de detectores gás, mostrou

ser uma importante ferramenta nos projetos de segurança industrial em unidades de processamento de petróleo que manipulam gases inflamáveis ou tóxicos.

8. RECOMENDAÇÕES E SUGESTÕES

- Com o aumento da capacidade computacional, incorporar na geometria da unidade as tubulações existentes, principalmente, aquelas de maiores diâmetros que passam pelo *pipe rack*, pois as mesmas podem influenciar no perfil da nuvem formada;
- Com base nos estudos de risco, em especial a Análise Preliminar de Perigos - APP, aumentar o número de pontos de vazamentos simulados, tornando a análise mais próxima da realidade;
- Neste trabalho adotou-se a condição de gás ideal para o hidrogênio. No entanto, principalmente em condições de processo com pressões mais severas, é importante que seja avaliada a viabilidade da adoção da condição de idealidade do gás ou se será necessário o uso de outra equação de estado;
- Analisar como a localização e a quantidade dos detectores seriam influenciadas quando o parâmetro tempo de detecção fosse considerado. Quanto mais rápido o vazamento fosse detectado, a princípio, melhor seria este ponto de detecção. Desta forma, seria necessária a realização de simulações transientes;
- Dada a enorme quantidade de simulações que são necessárias, nos estudos de dispersão de gases em unidades de processo e em plataformas, não é comum simular, para um mesmo ponto de vazamento, todas as direções de vazamento possíveis. Desta forma, seria interessante pesquisar uma distância mínima entre o ponto de vazamento e o ponto de detecção, de modo que o detector não fique muito próximo à liberação, evitando que vazamentos em direções diferentes daquelas simuladas não sejam cobertos por este detector. Em outras palavras, isso significa dizer que quando não forem feitas simulações em todas as direções de vazamento para um mesmo ponto, não se deve alocar o detector muito próximo ao ponto, pois se o vazamento ocorrer em outra direção, este detector provavelmente não será capaz de capturá-lo;
- Aprimorar o programa criado para avaliação do posicionamento de detectores para que o mesmo também seja capaz de ser usado para vazamentos multicomponentes, por exemplo, em correntes que contenham hidrocarboneto e gás sulfídrico (H_2S), muito comuns em refinarias. Sendo assim, o programa interpretaria as concentrações dos diferentes compostos e selecionaria o tipo de detector mais apropriado para cada situação.

9. BIBLIOGRAFIA

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **NBR IEC 60079-10-1**: Atmosferas Explosivas. Parte 10-1: Classificação de Áreas – Atmosferas Explosivas de Gás, 2009.

ALVES, J. V. B. **Hidrociclone para a Separação do Óleo Residual de Água em Refinarias**. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2012.

ANSYS 13.0 Help, 2011.

BAKKE, J. R.; HANSEN, O. R. **Probabilistic Analysis of Gas Explosion Loads**, FABIG Newsletter, Issue No 34, January, 2003.

BEEK, W. J.; MUTZALL, K. M. K. **Transport Phenomena**. Wiley, New York, 1975.

BIRD, B. R.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. **Fenômenos de Transporte.** 2ª Edição. Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.

CENTER for CHEMICAL PROCESS SAFETY (CCPS). **Continuous Monitoring for Hazardous Material Release**. Wiley, 2009.

CHAINEAUX, J. **Leak of Hydrogen from a Pressurized Vessel**. Workshop on Dissemination of Goals, Preliminary Results and Validation of Methodology, 1999.

COX, A. W.; LEES, F. P.; ANG, M. L. Classification of Hazardous Locations. Institution of Chemical Engineers (IChemE), 2003.

CROWL, D. A.; LOUVAR, J. F. **Chemical Process Safety: Fundamentals with Applications**. 2nd Edition. Prentice Hall, Inc., 2002.

DO BRASIL, N. I.; ARAÚJO, M. A. S.; MOLINA, E. C.; ABADIE, E. *et al*. **Processamento de Petróleo e Gás – Petróleo e Seus Derivados, Processamento Primário, Processos de Refino, Petroquímica, Meio Ambiente**. LTC, 2011.

FLECK, A. B. **Dispersão de Gases Inflamáveis em Plataforma Offshore: Localização de Detectores**. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2008.

FREIRE, A. P. S.; MENUT, P. M. M.; SU, J. **Turbulência.** Rio de Janeiro: ABCM, v. 1, 1998.

HEALTH & SAFETY EXECUTIVE. **Fire and Explosion Strategy – Issue 1, Hazardous Installations Directorate**, Offshore Division, 2004.

HEALTH & SAFETY EXECUTIVE. **Offshore Detector Siting Criterion Investigation of Detector Spacing by Lloyds Register**, Offshore Technology Report, 1993.

HEALTH & SAFETY EXECUTIVE. **Offshore Hydrocarbon Releases Statistics and Analysis**, Hid Statistics Report, 2001.

HEALTH & SAFETY LABORATORY. **CFD Modelling of Low Pressure Jets for Area Classification**, Fire and Explosion Group, 2005.

HEALTH & SAFETY LABORATORY. **Guidance for NSD on the Assessment of CFD Simulations in Safety Cases**, 1997.

HEALTH & SAFETY LABORATORY. **Guidance for NSD on the Assessment of CFD Simulations in Safety Cases**, 1997.

HEALTH & SAFETY LABORATORY. **Outstanding Safety Questions Concerning tha Analysis of Ventilation and Gas Dispersion in Gas Turbine Enclosures: Best Practice Guidelines for CFD**, Fire and Explosion Group, 2003.

INTERNATIONAL ASSOCIATION OF OIL & GAS PRODUCERS (OGP). **Riser and Pipeline Release Frequencies.** Report 434-4, 2010.

KELSEY, A.; HEMINGWAY, M. A.; WALSH, P. T.; CONOLLY, S. **Evaluation of Flammable Gas Detector Networks Based on Experimental Simulations of Offshore, High Pressure Gas Releases**, 2002.

KELSEY, A.; IVINGS, M. J.; HEMINGWAY, M. A.; WALSH, P. T. **Sensitive Studies of Offshore Gas Detector Networks Based on Experimental Simulations of High Pressure Gas Releases**. Institution of Chemical Engineers, Process Safety and Environmental Protection, 83(B5): 1-8, Part B, 2005.

LEES, F. P. **Loss Prevention in Process Industries**, 2ª Edição, Elsevier, 1996.

MALALASEKERA, W.; VERSTEEG, H. K. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics – The Finite Volume Method**. Longman Group Ltd, Inglaterra, 1995.

MIDDHA, P.; HANSEN, O. R.; STORVIK, I. E. **Validation of CFD-Model for Hydrogen Dispersion**, Journal of Loss Prevention in the Process Industries 22, 1034-1038, 2009.

MIYATA, E.; MORI, S. **Optimization of Gas Detector Locations by Application of Atmospheric Dispersion Modeling Tools.** Sumitomo Chemical Co., Process & Production Tecnology Center, 2011.

RIGAS, F; SKLAVOUNOS, S. **Validation of Turbulence Models in Heavy Gas Dispersion Over Obstacles**, Journal of Hazardous Materials A108, 9-20, Janeiro 2004.

ROBERTS, P. T.; SHIRVILL, L. C.; ROBERTS, T. A.; BUTLER, C. J.; ROYLE, M. **Dispersion of Hydrogen from High-Pressure Sources**, Shell Global Solutions International B.V., Symposium Series N° 151, 2006.

RUIFENG, Q.; DEDY, N.; CORMIER, B. R.; MANNAN, M. S. **Numerical Simulations of LNG Vapor Dispersion in Brayton Fire Training Field Tests with ANSYS CFX**, Journal of Hazardous Materials 183, 51-61, 2010.

SANTOS, F. P. dos. **Simulação Numérica da Fluidodinâmica de um Riser de FCC**. Dissertação de Projeto Final – Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2007.

SCHÄFER, M. **Computational Engineering- Introduction to Numerical Methods**. New York: Spring, 2006.

SCHEFER, R. W.; HOUF, W. G.; WILLIAMS, T. C.; BOURNE, B.; COLTON, J. **Characterization of High-Pressure, Underexpanded Hydrogen-Jet Flames**, International Journal of Hydrogen Energy 32, 2081-2093, 2007.

SILVA, L. F. L. R. **Desenvolvimento de Metodologias para Simulação de Escoamentos Polidispersos**. Tese de Doutorado - PEQ/COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2008.

STRϕM, O.; BAKKE, J. R. **Gas Detector Location**, Safety on Offshore Installations Conference, 3.3.1-3.3.12, 1999.

SU, J. **Introdução aos Modelos de Turbulência**, 2009.

TENNEKES, H; LUMLEY, J. L. **A First Course in Turbulence**. Cambridge, Massachusetts e Londres, 1972.

TNO. **Methods for the calculation of physical Effects** (Yellow Book). CPR14E, 3ª Edição, 2005.

WILCOX, D. C. **Turbulence Modeling for CFD**. Califórnia: DCW Industries, Inc., 1994.

ANEXO

Vento Sul

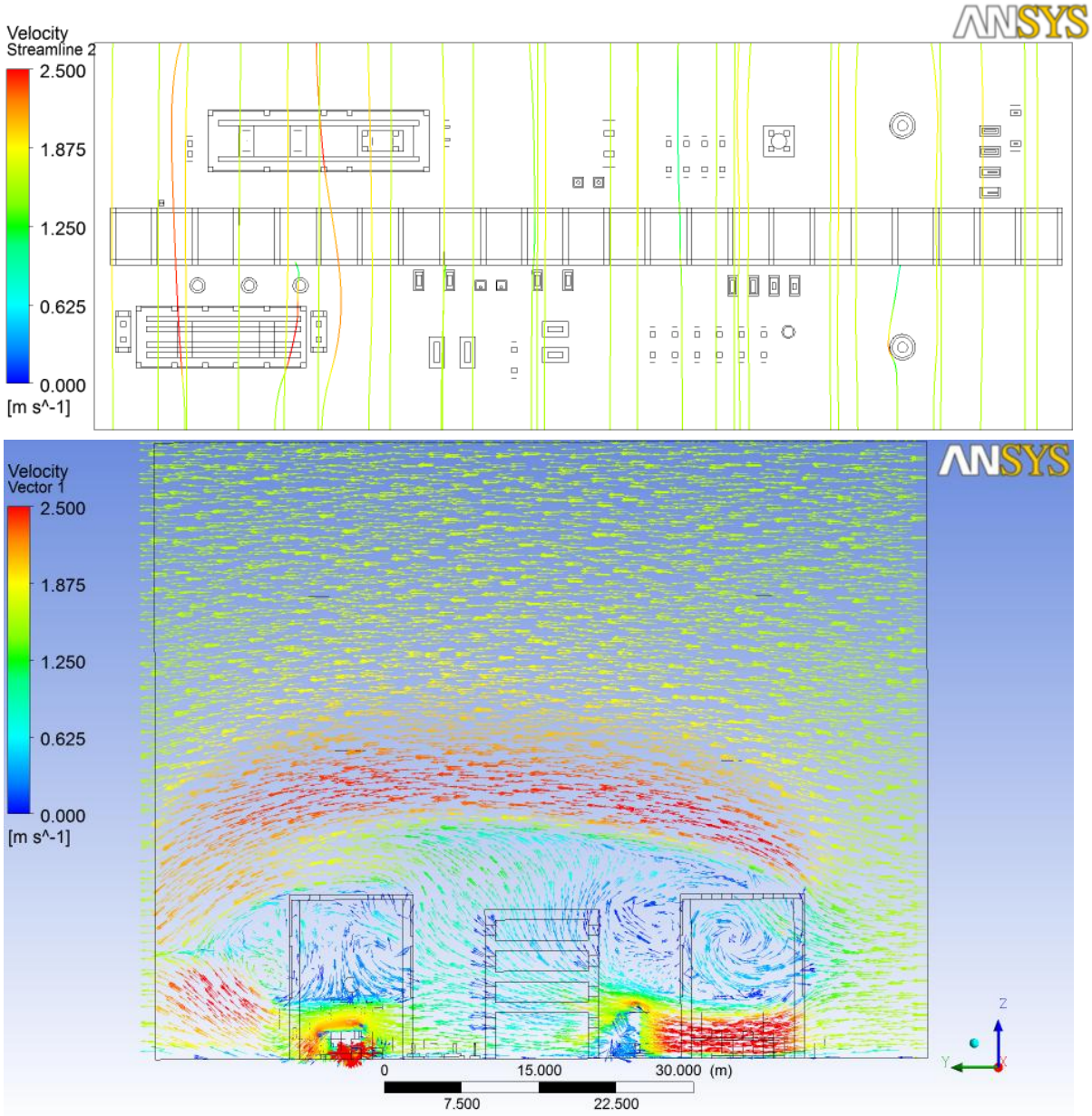


Figura 62: Campo de escoamento do vento na direção sul nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano ZY).

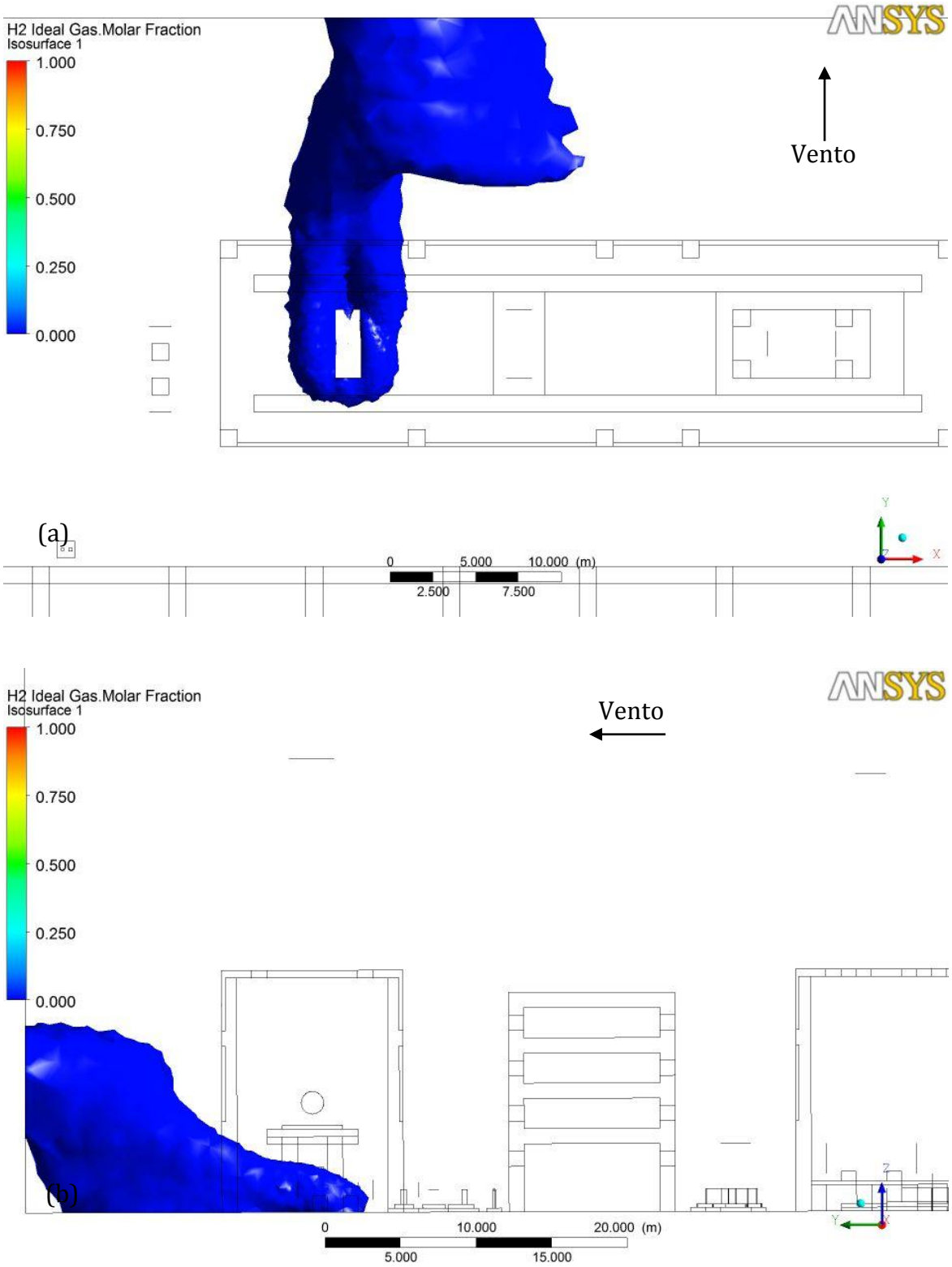


Figura 63: Cenário 5: Vento sul, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

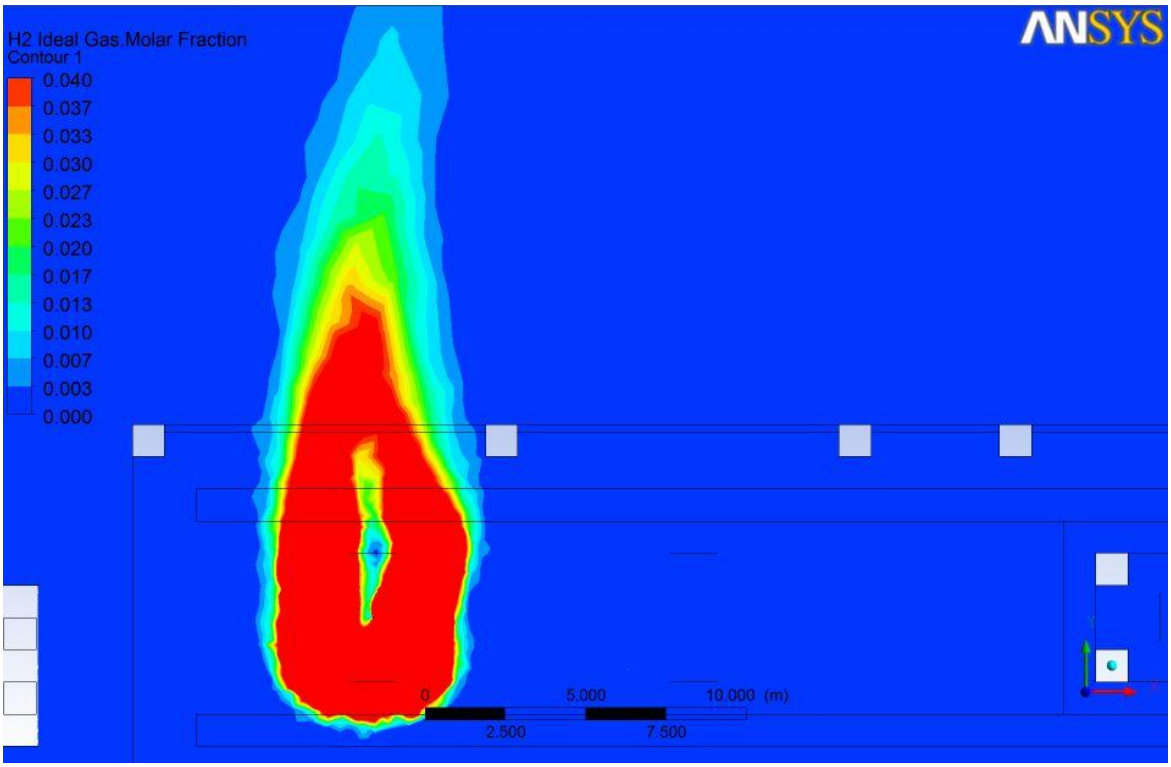
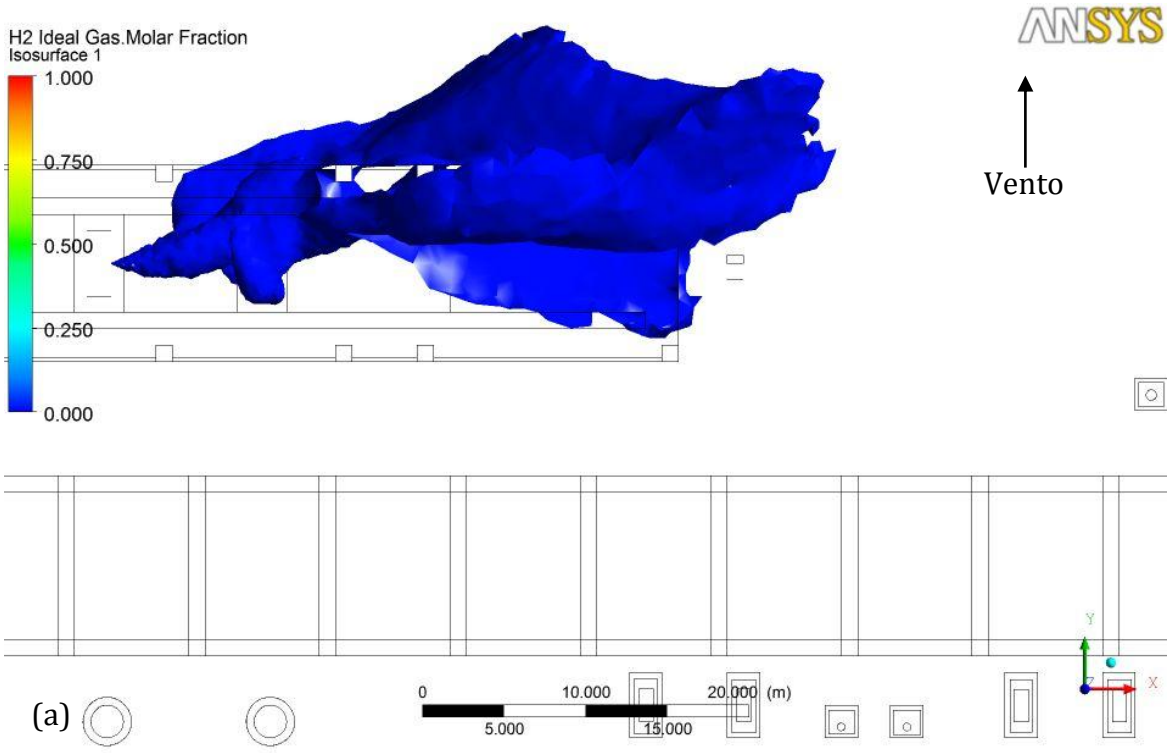


Figura 64: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento sul (cenário 5).



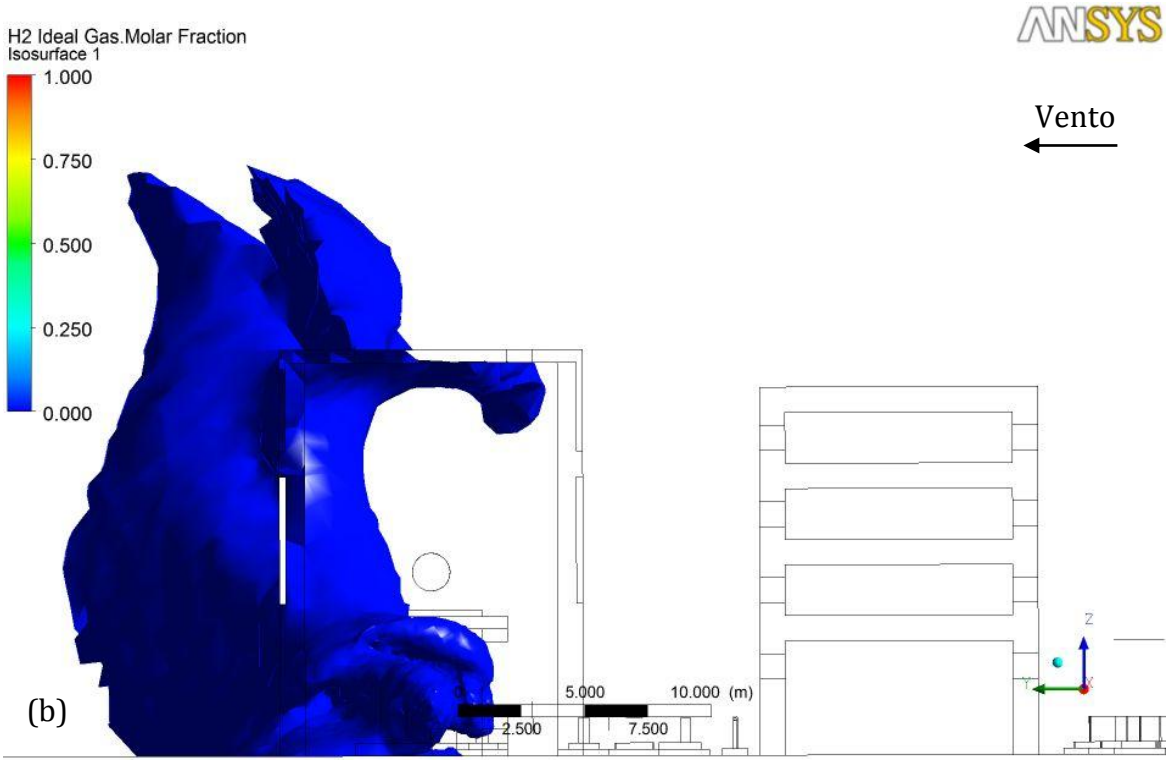


Figura 65: Cenário 6: Vento sul, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

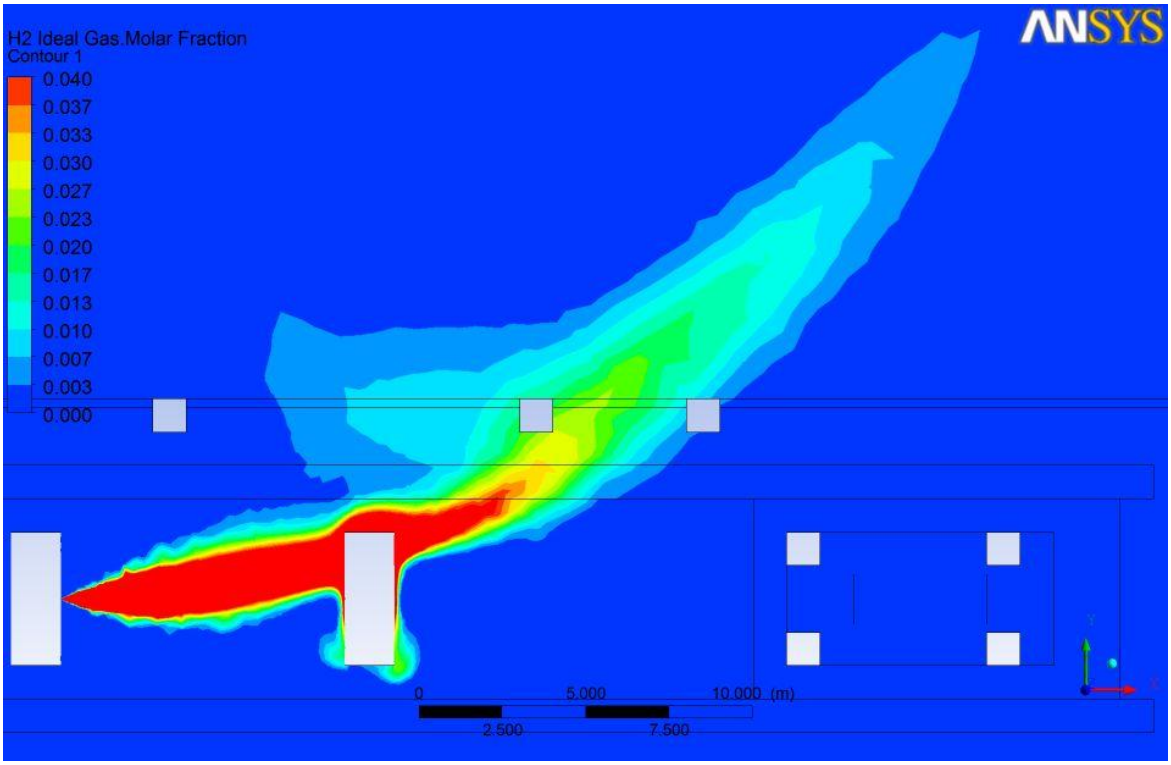


Figura 66: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento sul (cenário 6).

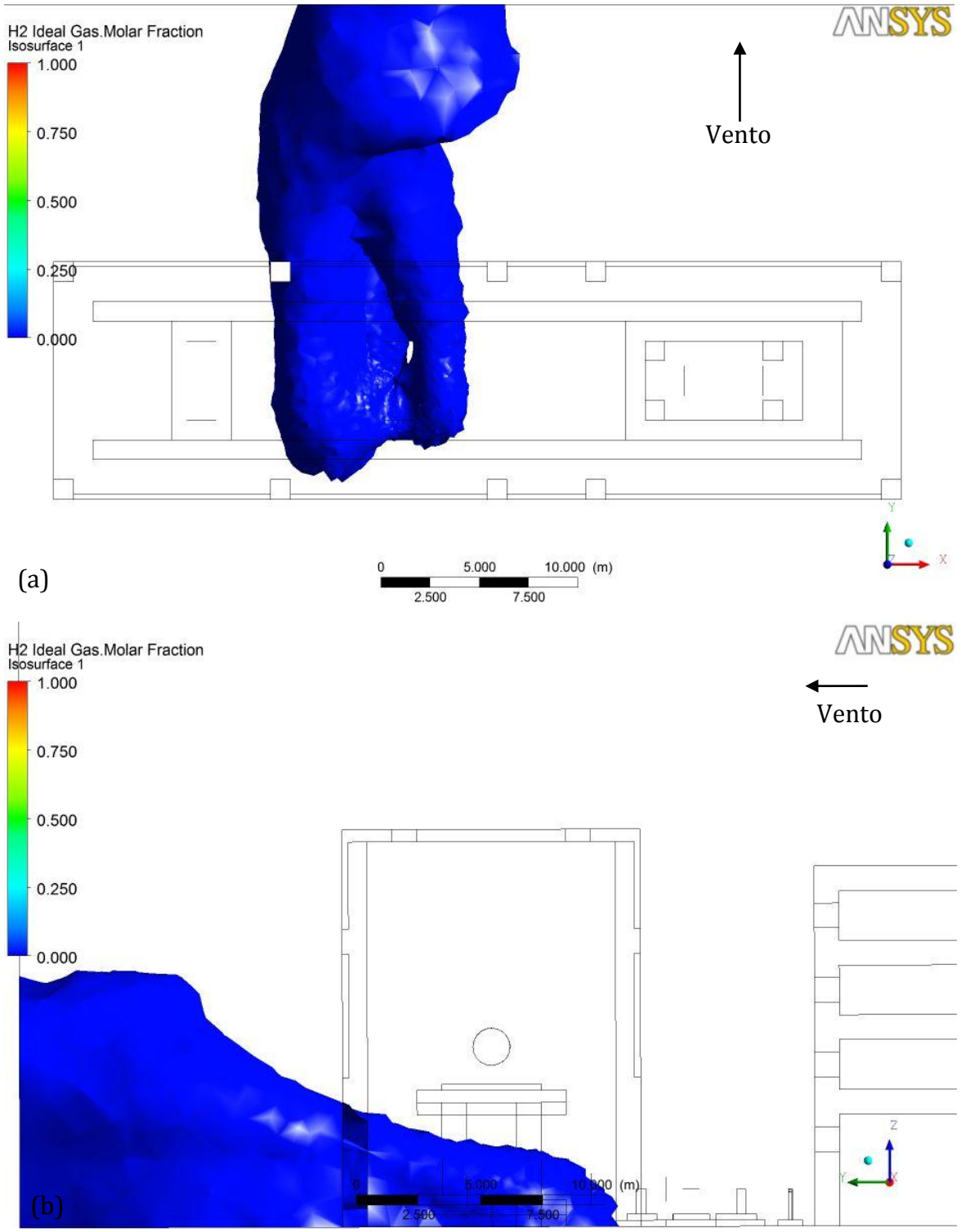


Figura 67: Cenário 7: Vento sul, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

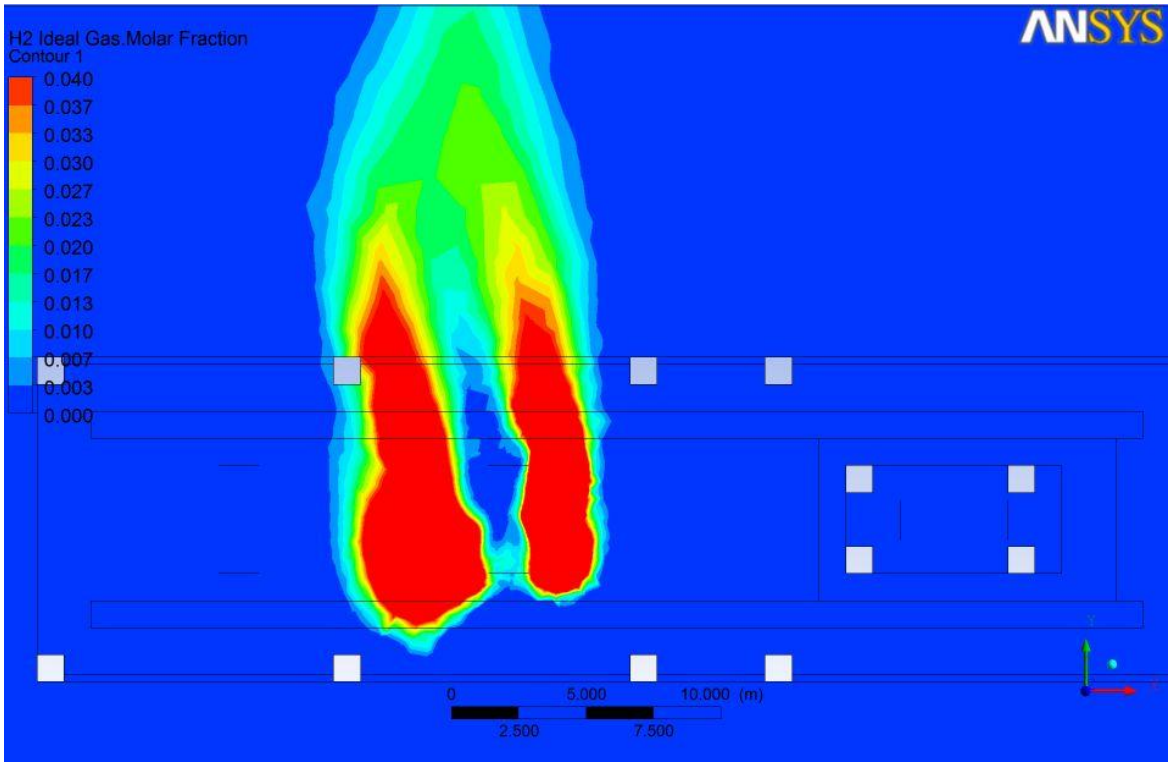
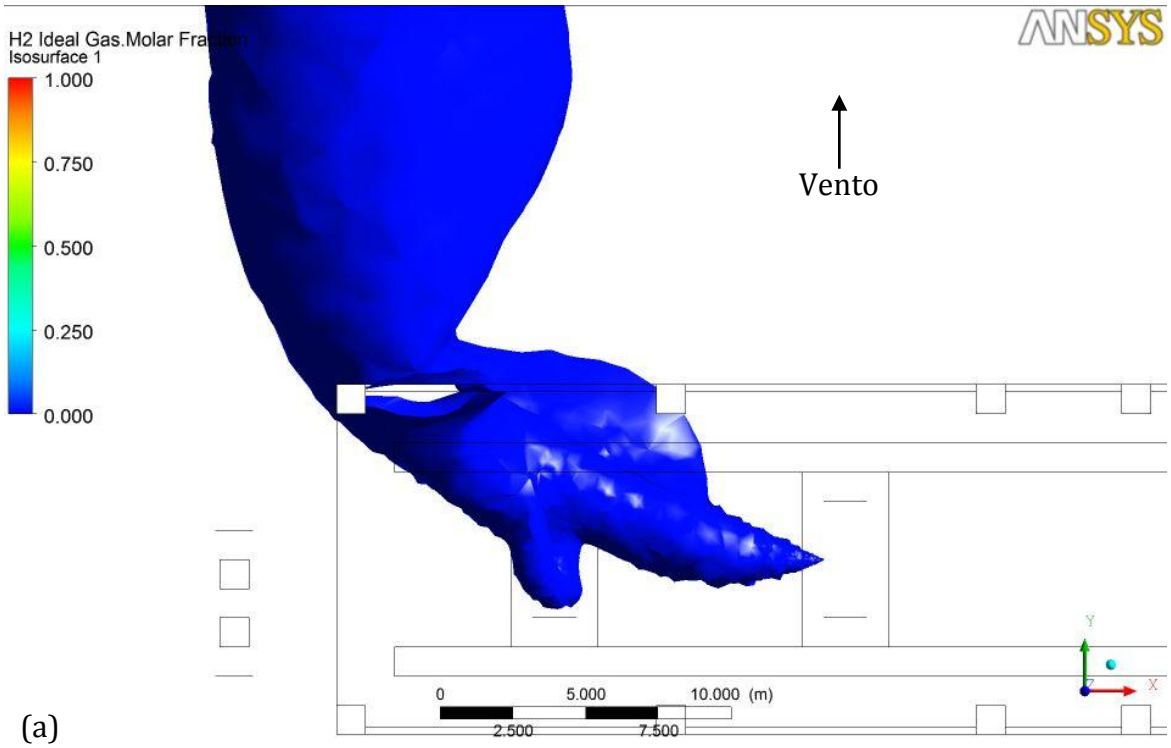


Figura 68: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento sul (cenário 7).



(a)

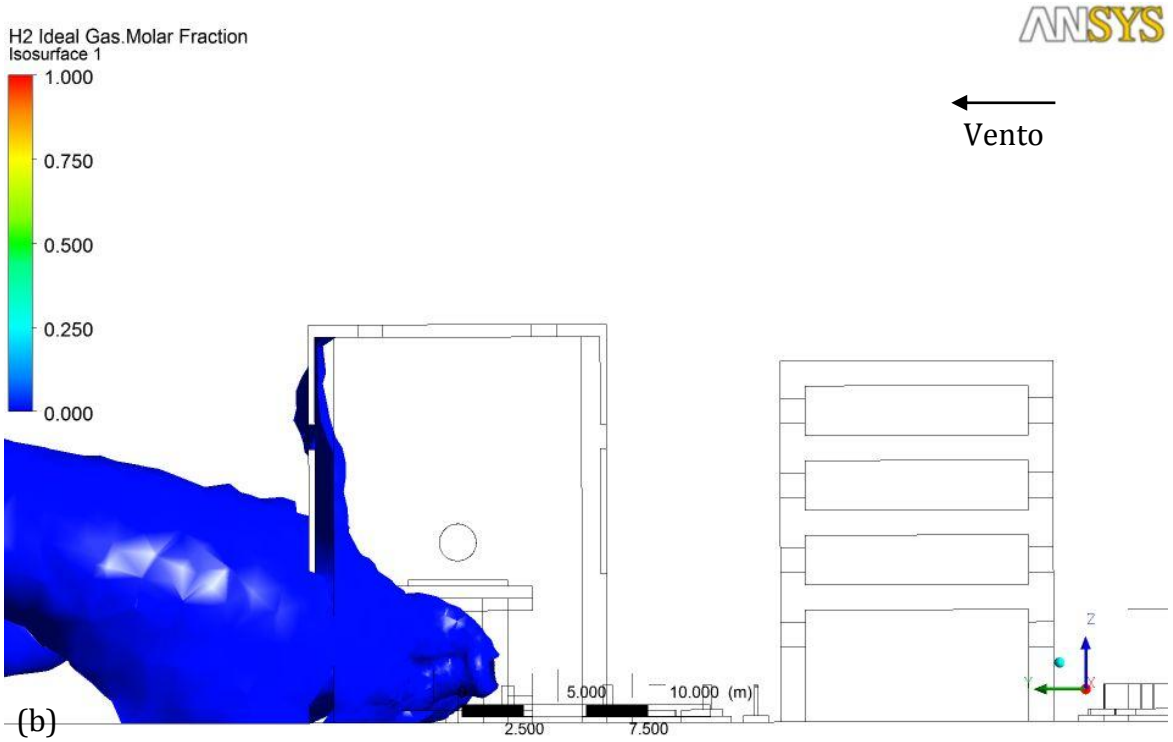


Figura 69: Cenário 8: Vento sul, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

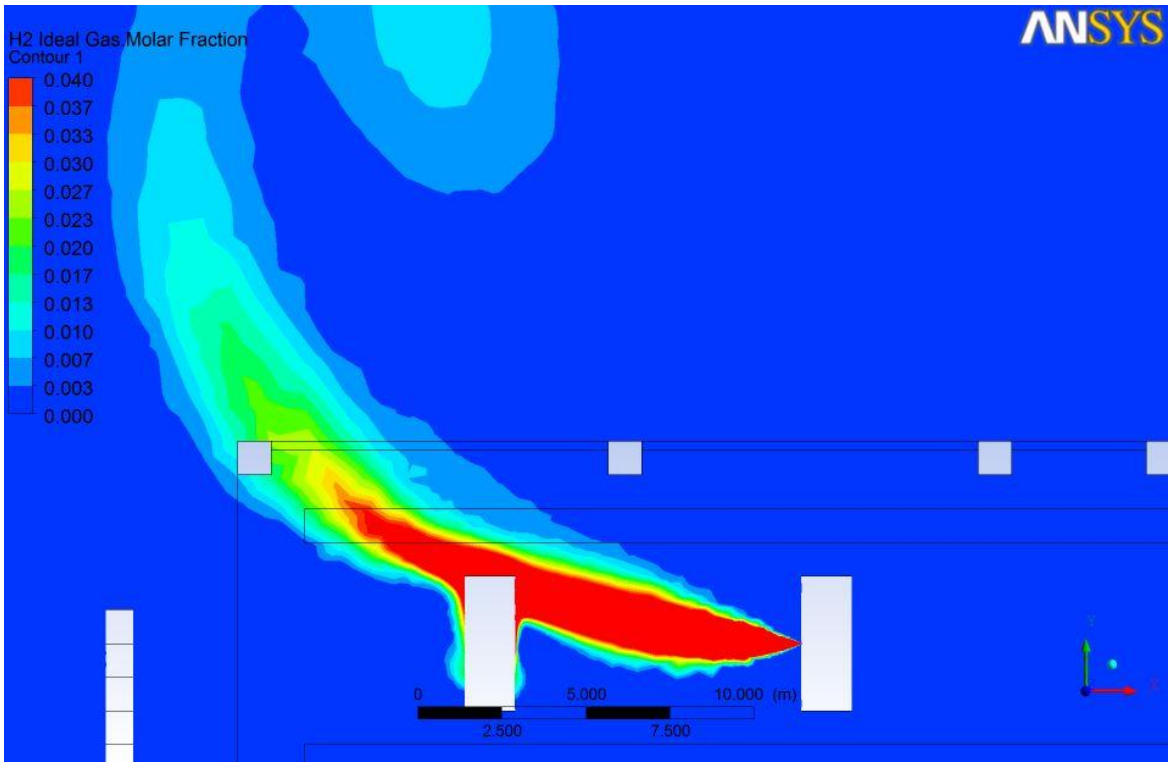


Figura 70: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento sul (cenário 8).

Vento Leste

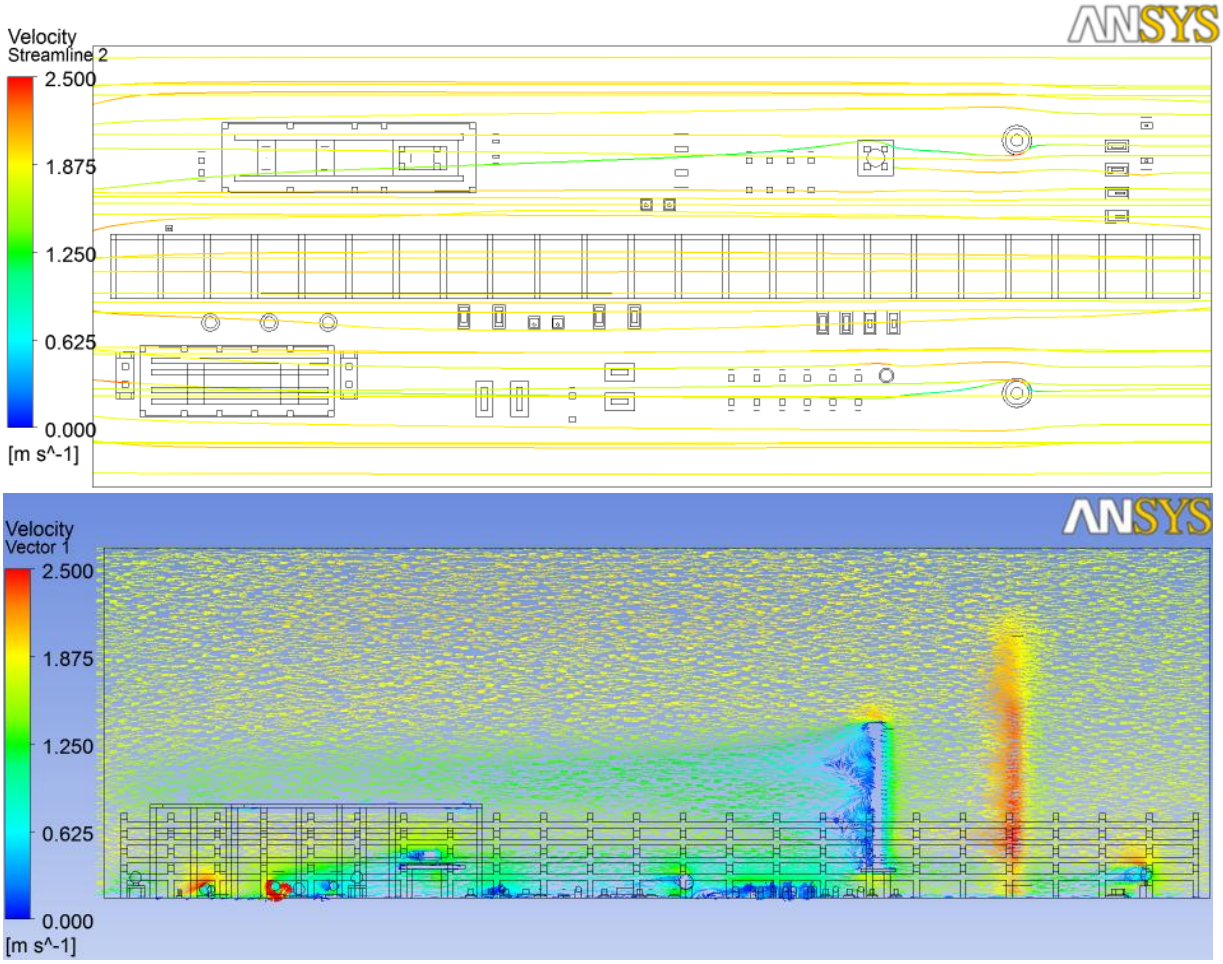


Figura 71: Campo de escoamento do vento na direção leste nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano ZX).

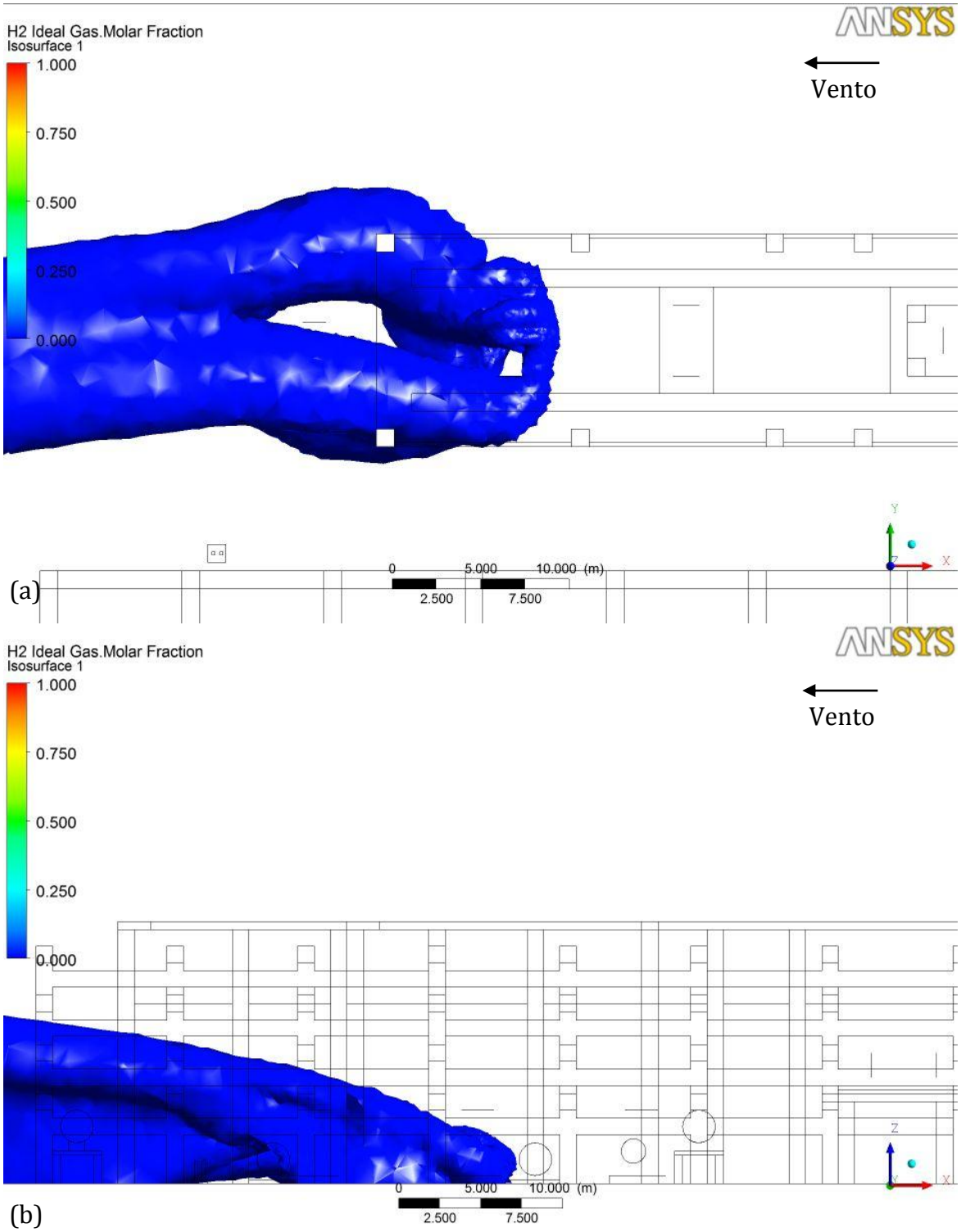


Figura 72: Cenário 9: : Vento leste, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

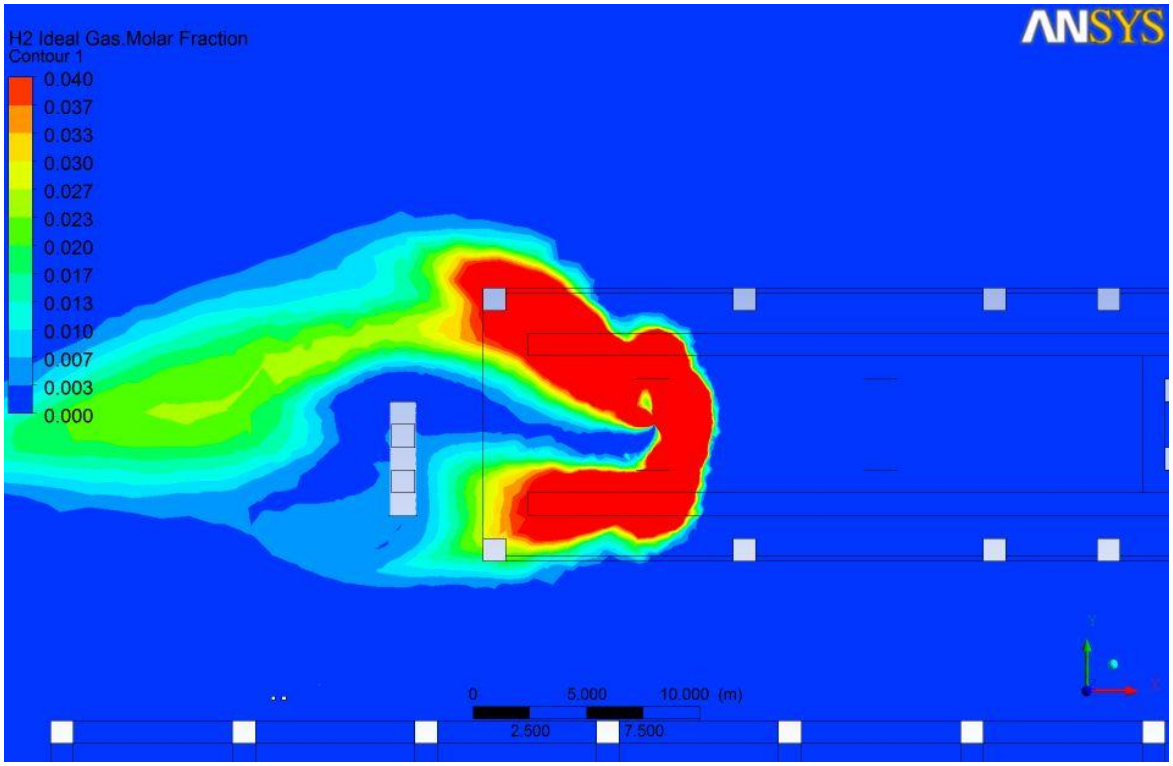
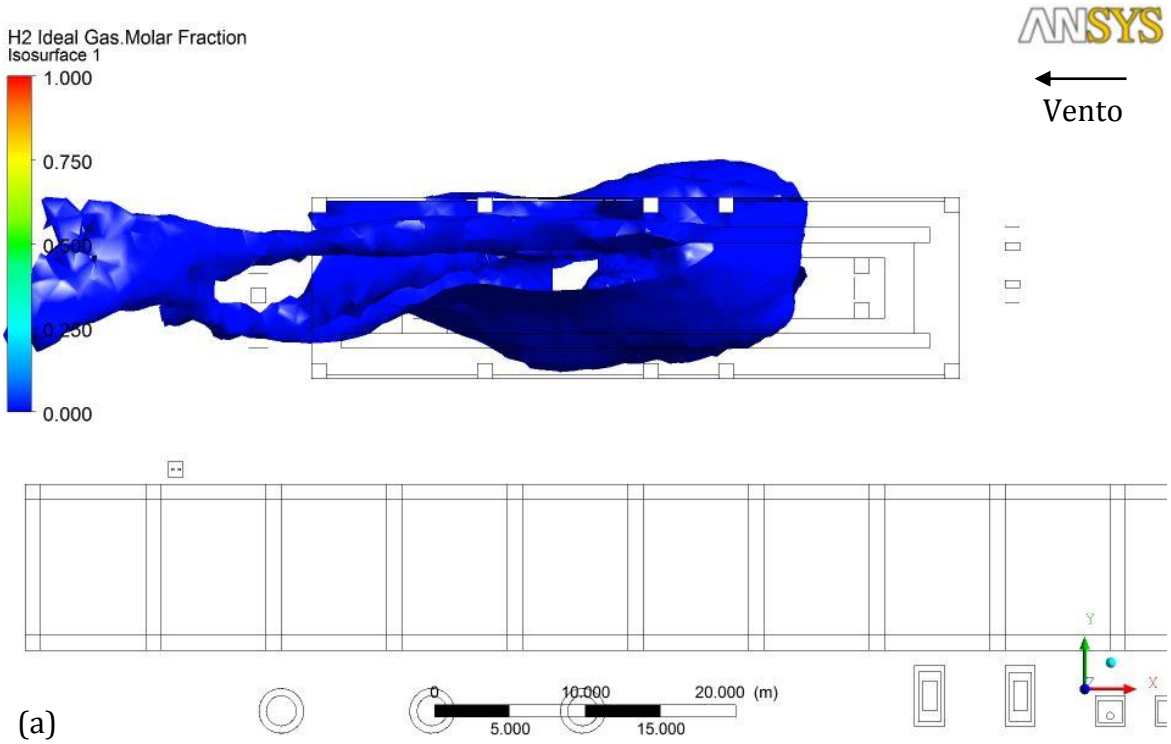


Figura 73: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento leste (cenário 9).



(a)

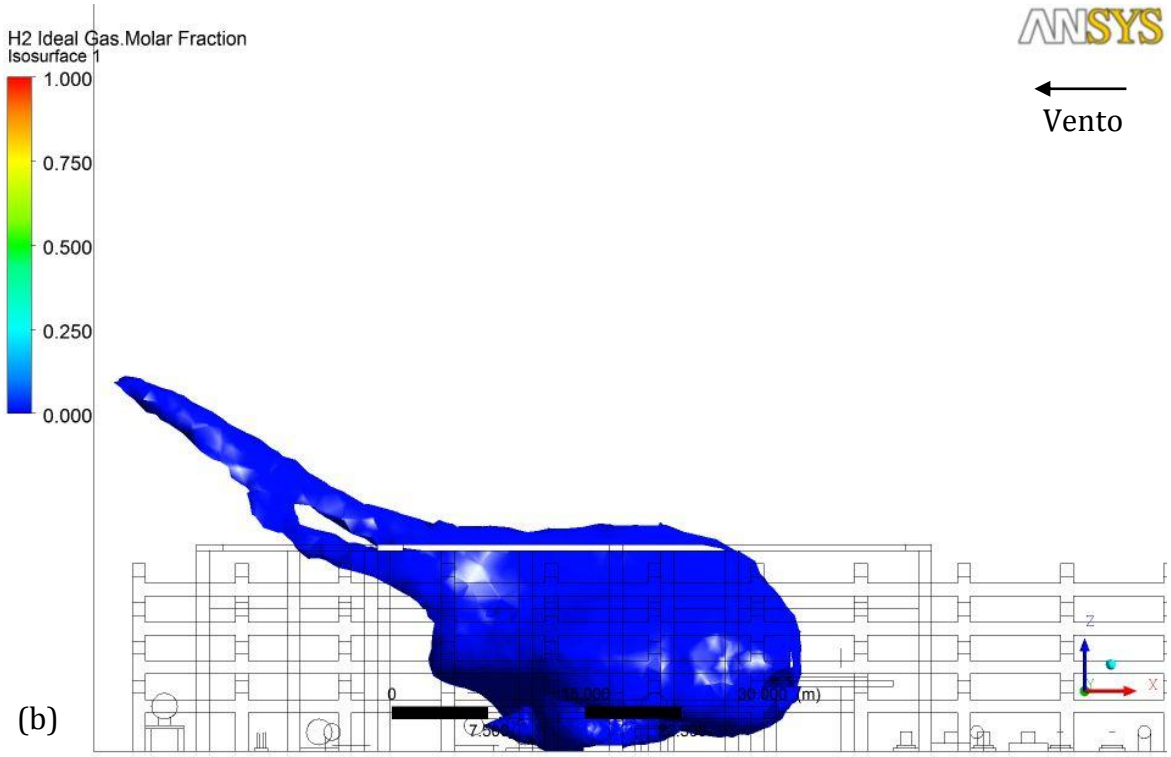


Figura 74: Cenário 10: Vento leste, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

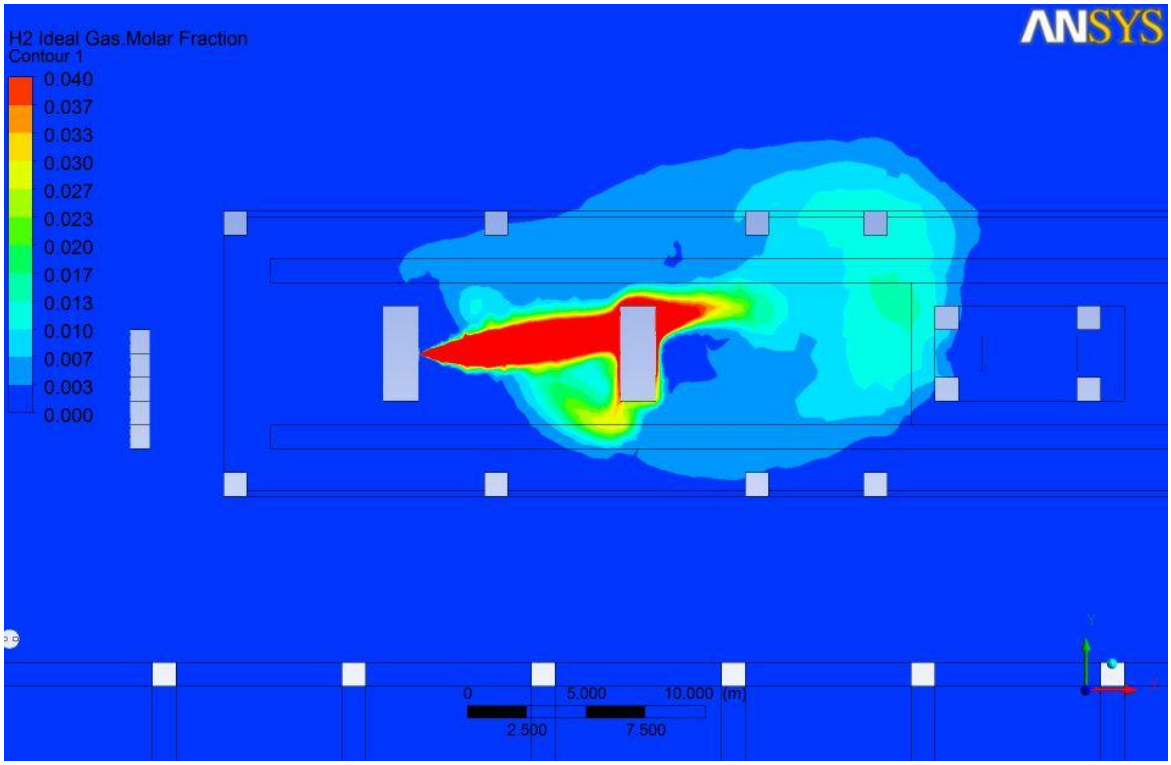


Figura 75: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento leste (cenário 10).

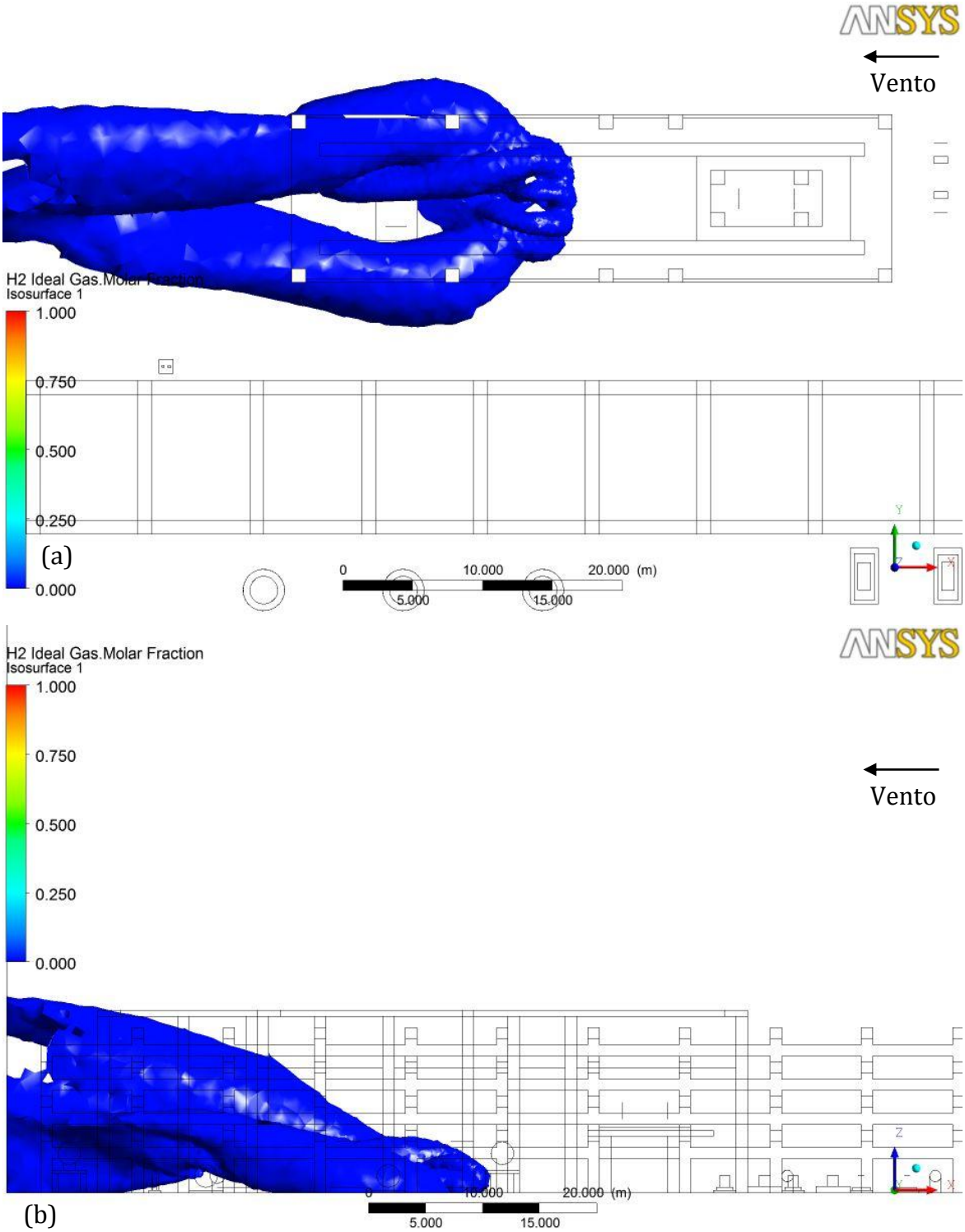


Figura 76: Cenário 11: Vento leste, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

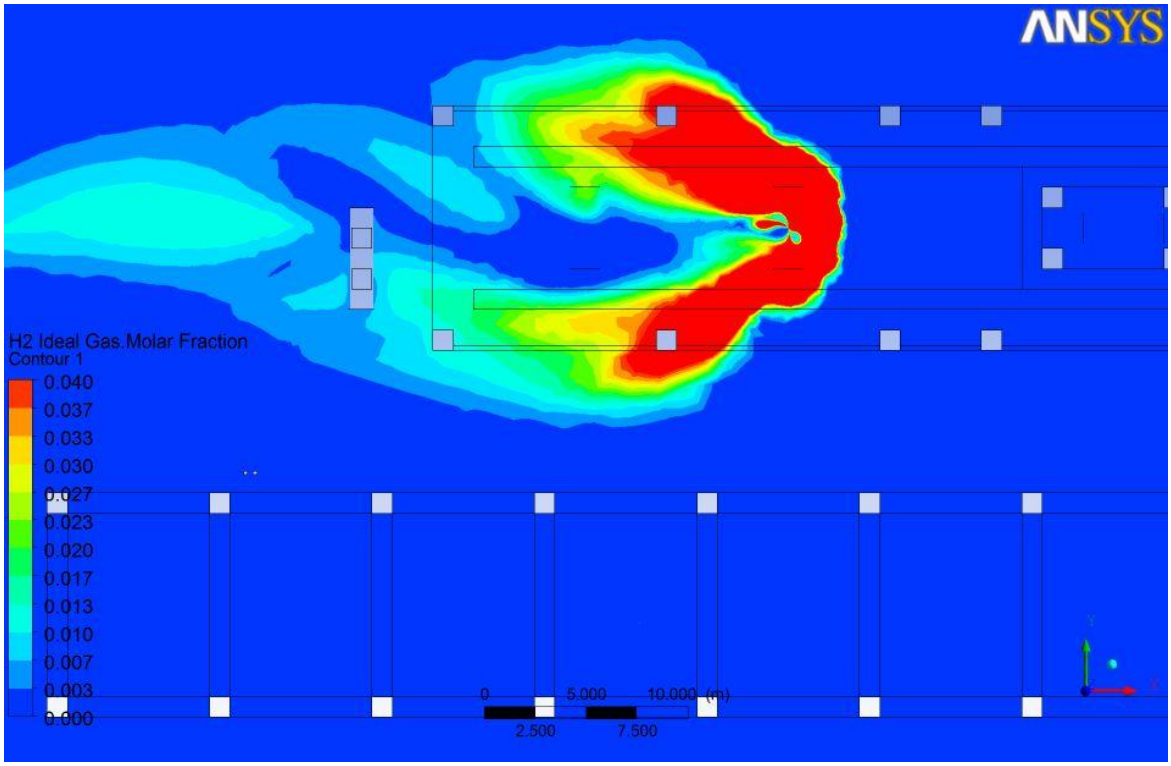
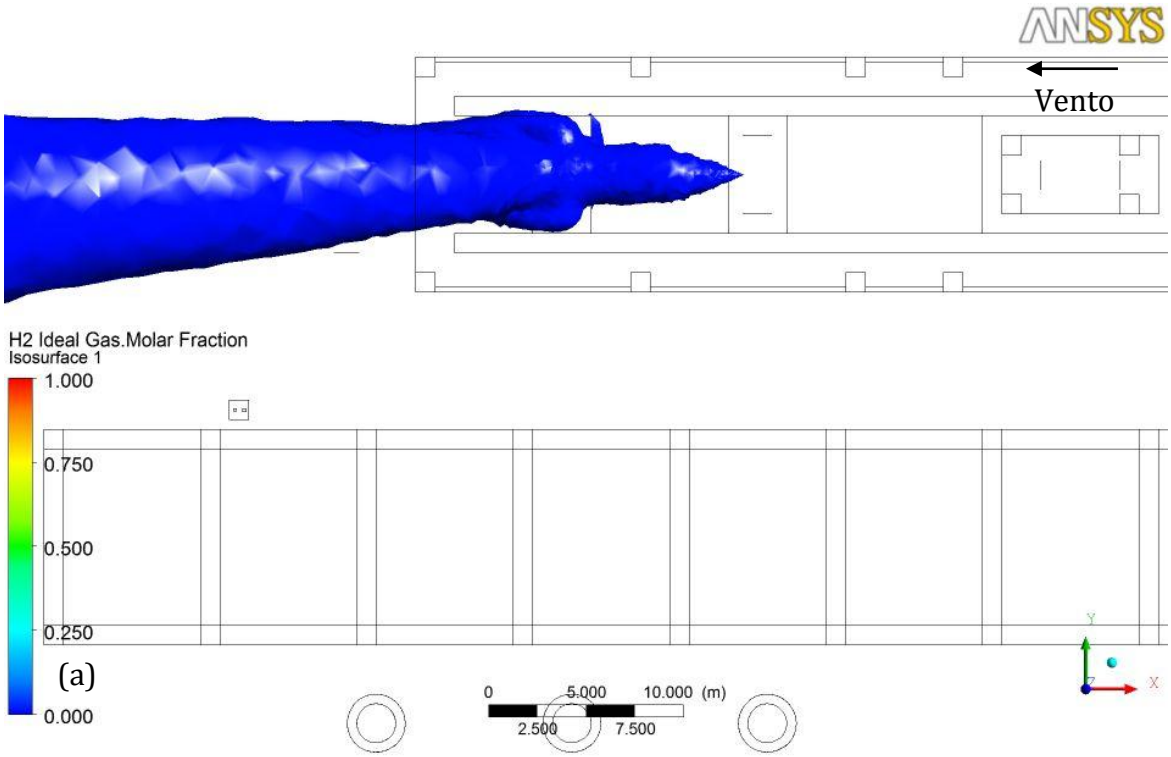


Figura 77: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento leste (cenário 11).



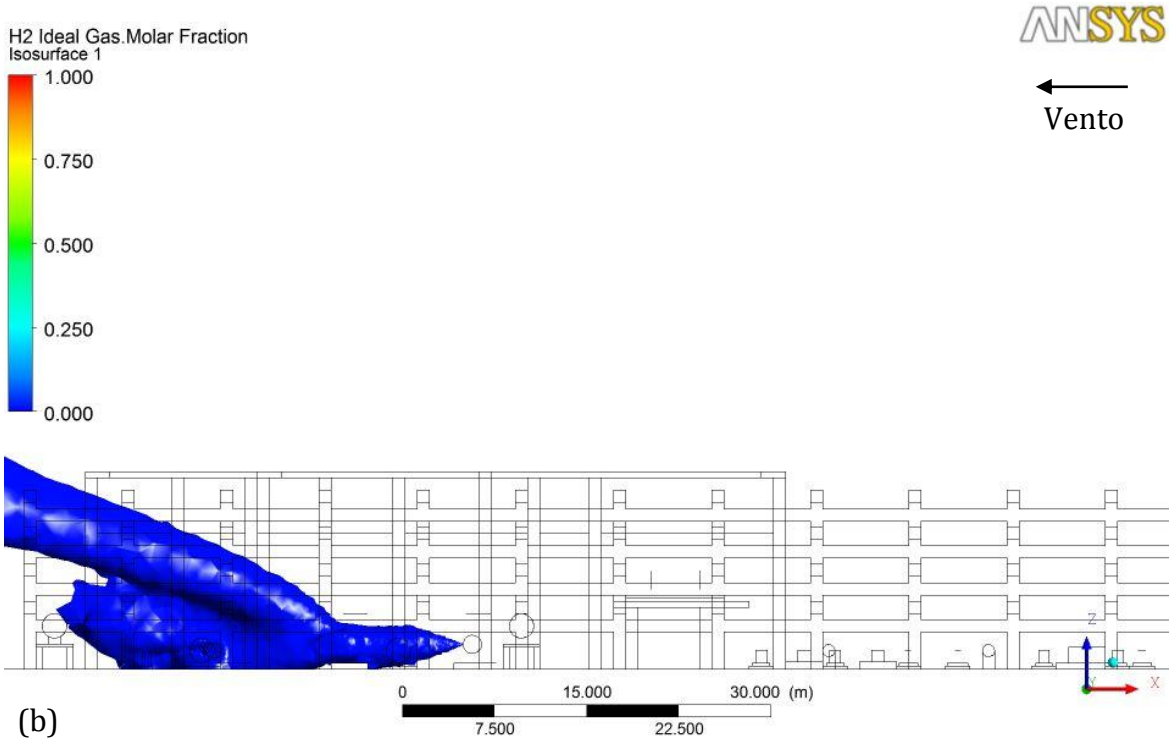


Figura 78: Cenário 12: Vento leste, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

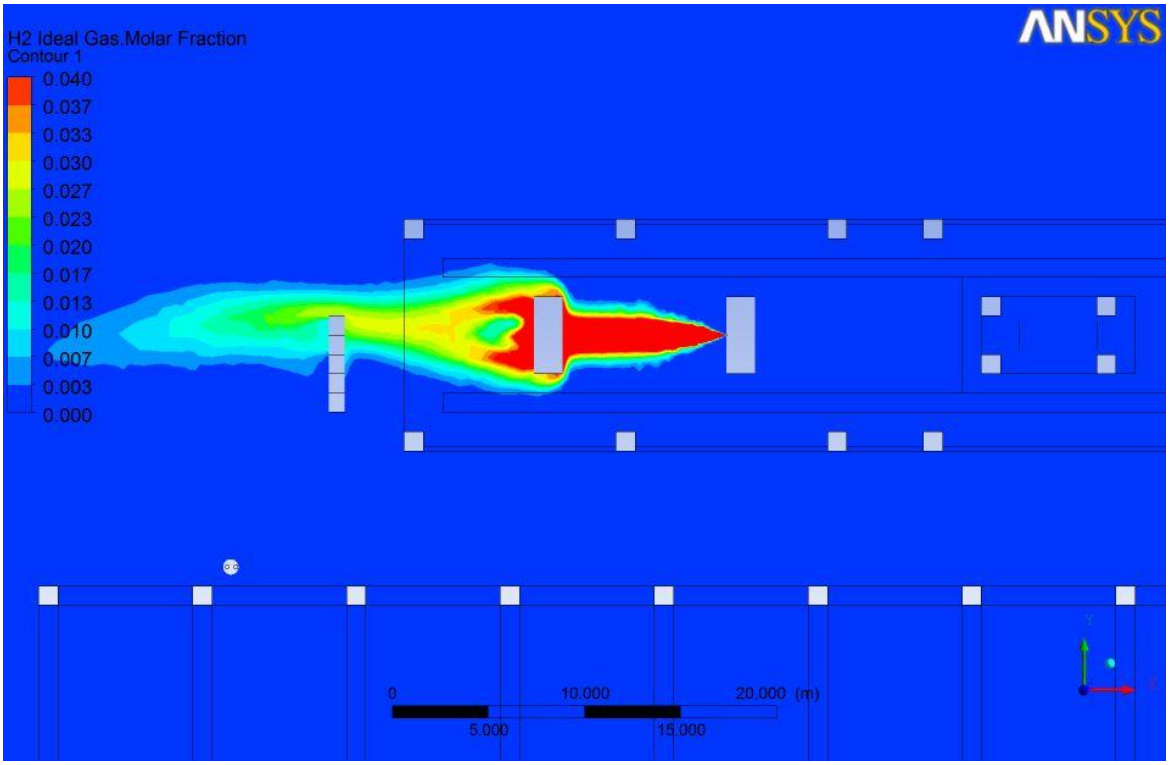


Figura 79: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento leste (cenário 12).

Vento Oeste

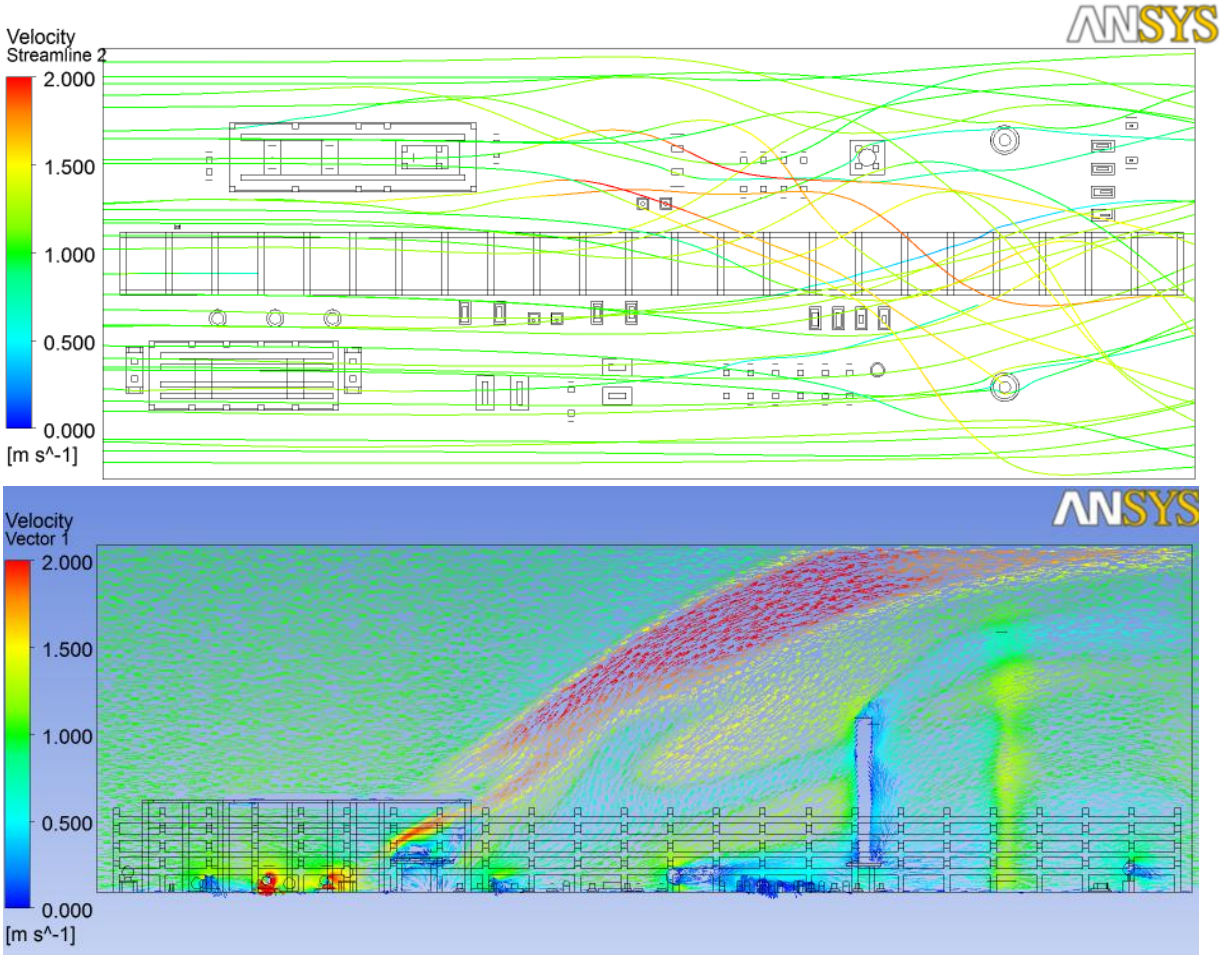


Figura 80: Campo de escoamento do vento na direção oeste nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano ZX).

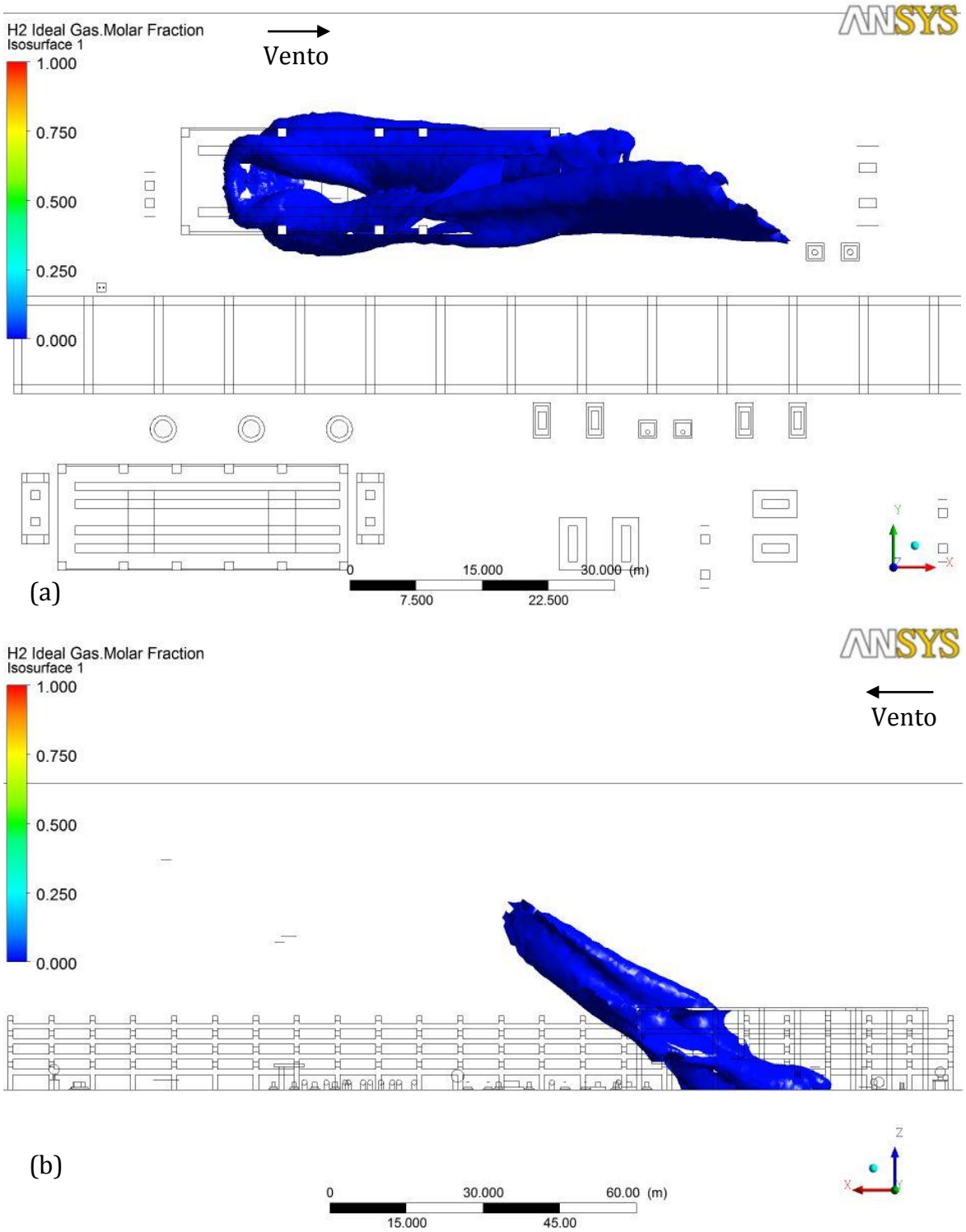


Figura 81: Cenário 13: Vento oeste, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

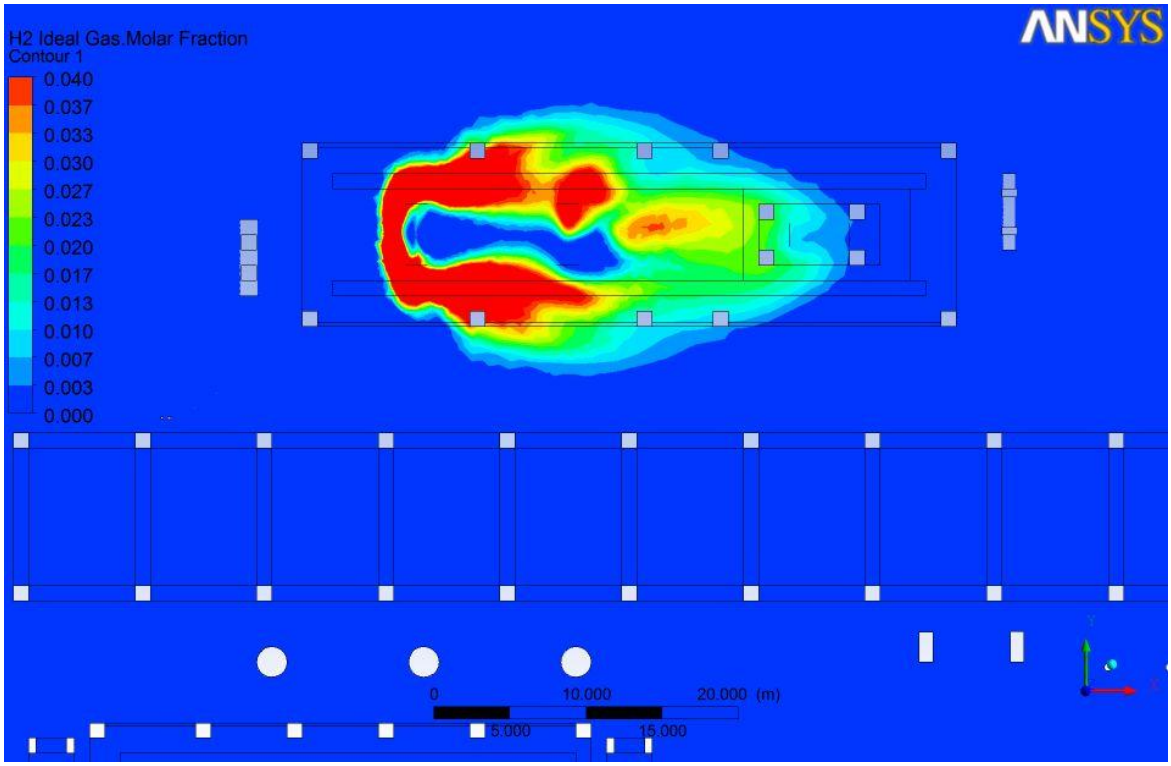
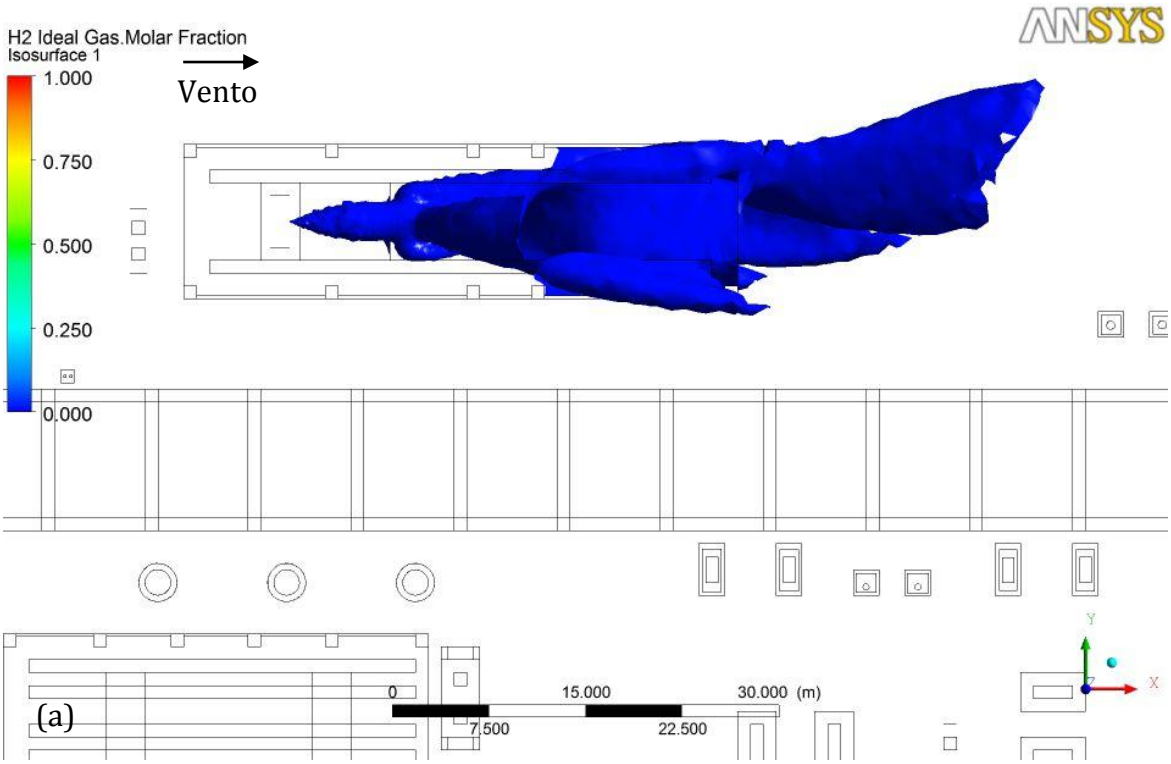


Figura 82: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento oeste (cenário 13).



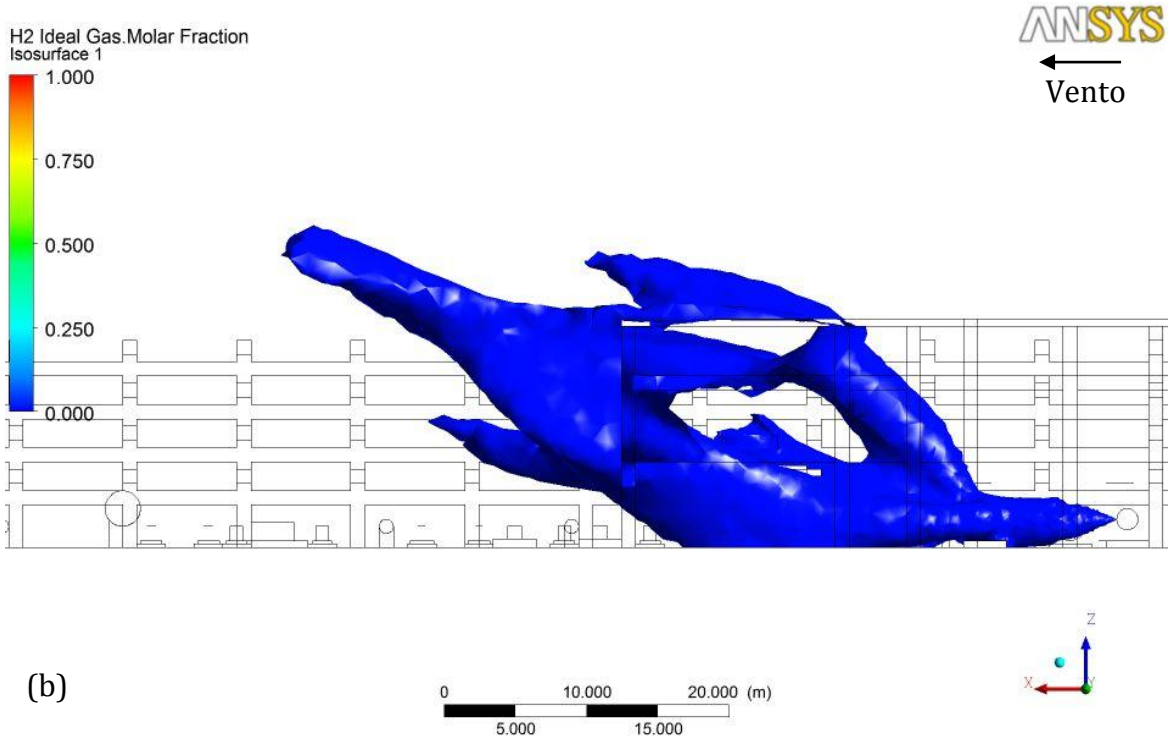


Figura 83: Cenário 14: Vento oeste, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

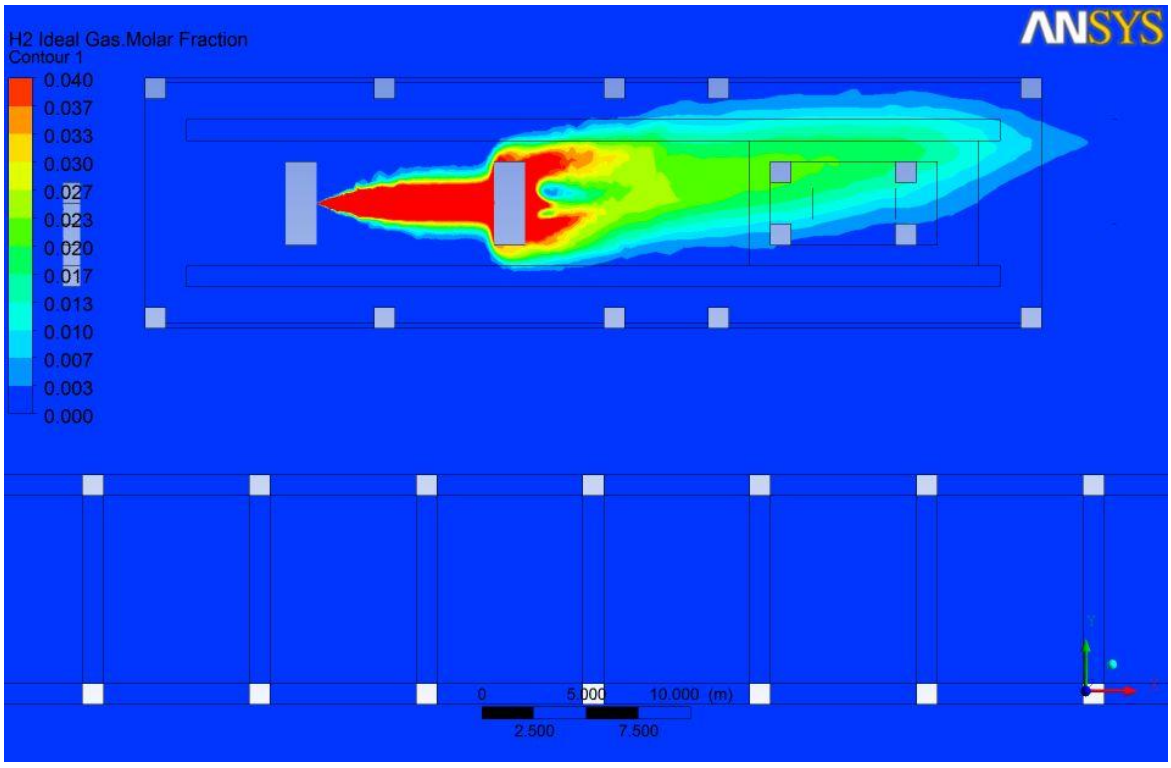


Figura 84: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento oeste (cenário 14).

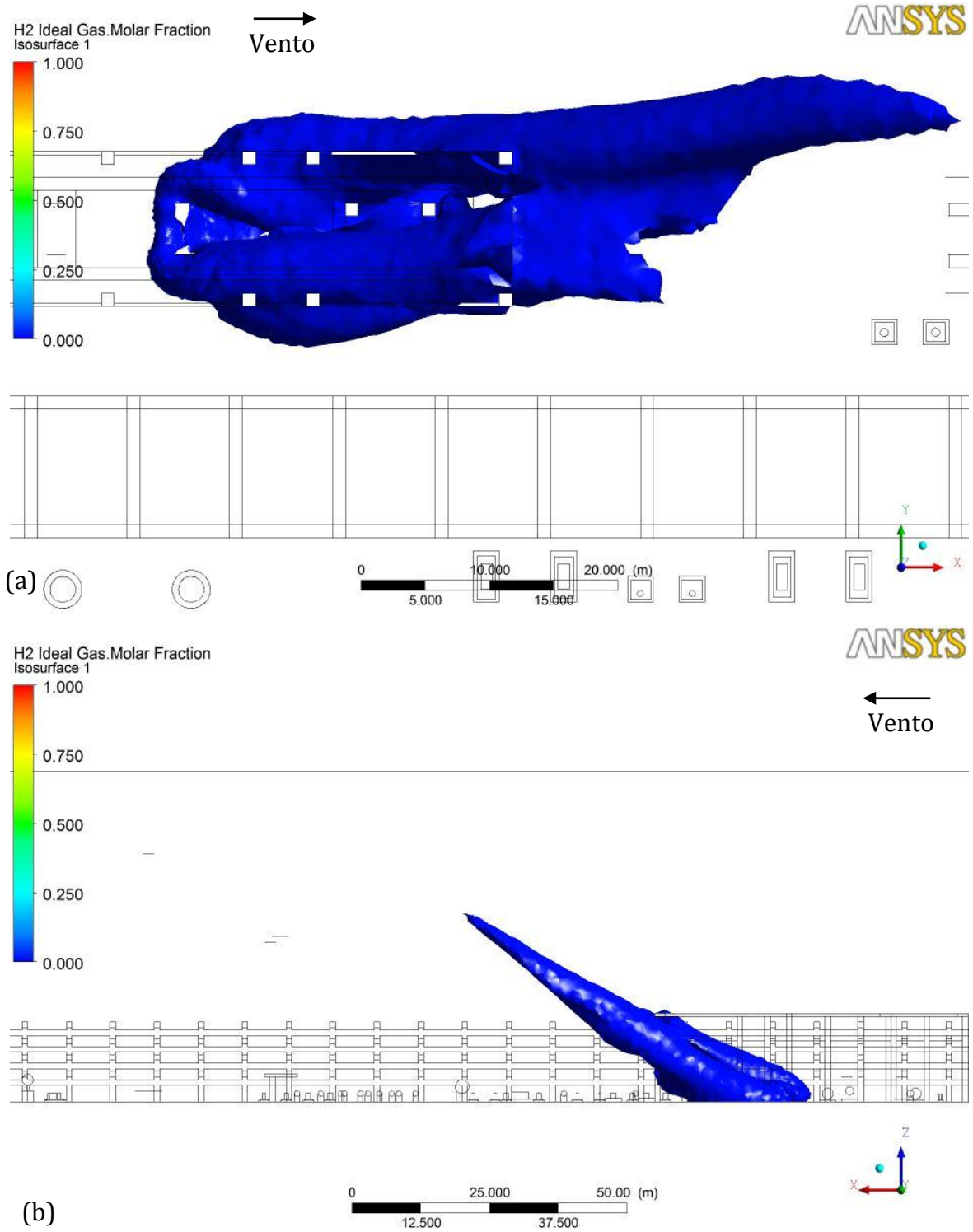


Figura 85: Cenário 15: Vento oeste, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

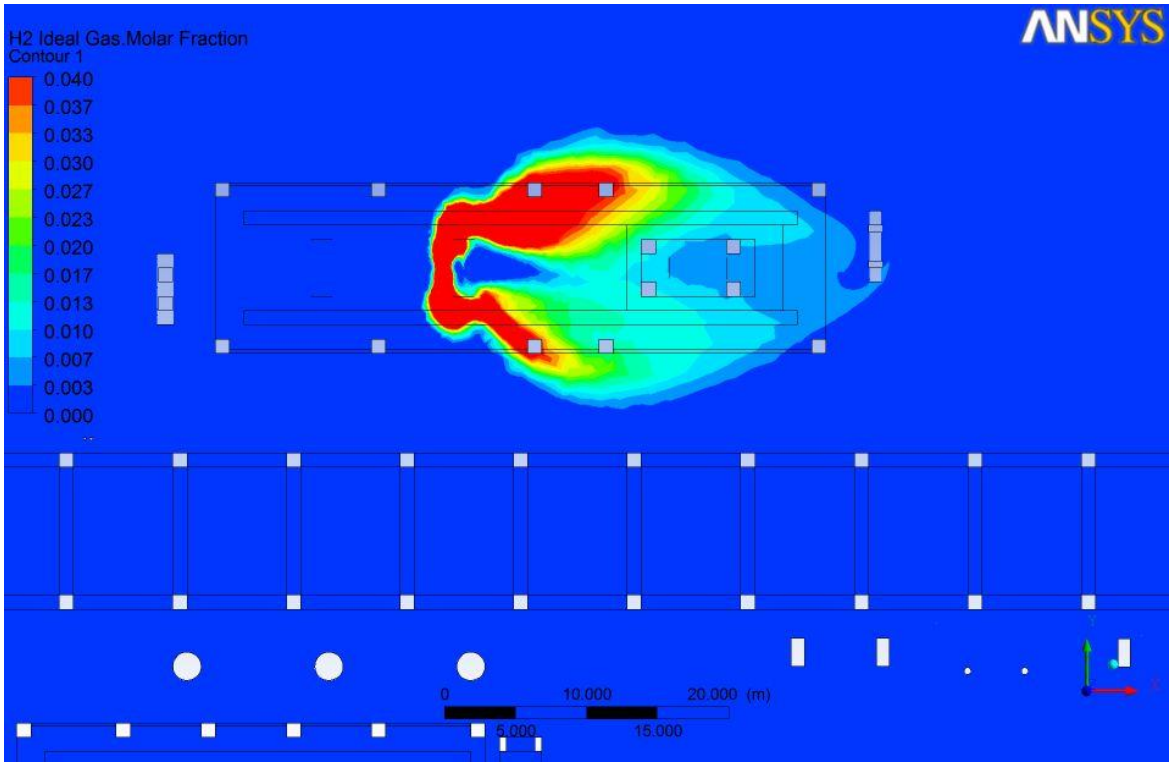
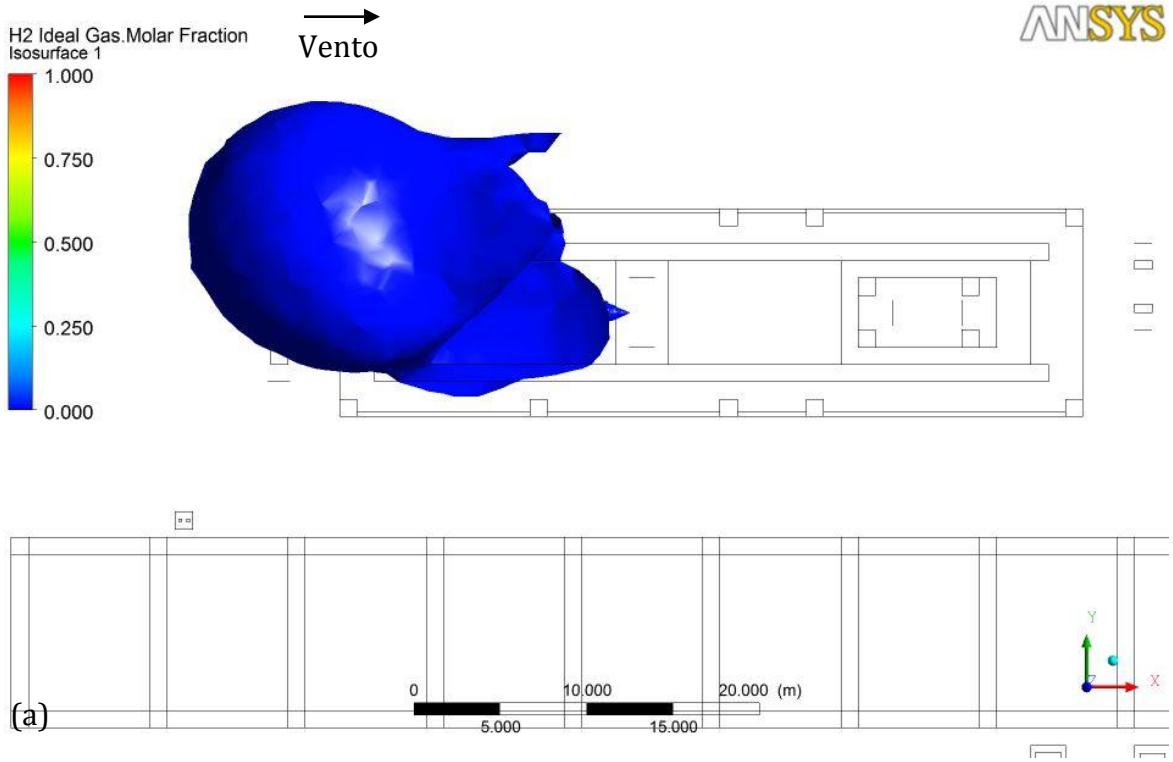


Figura 86: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento oeste (cenário 15).



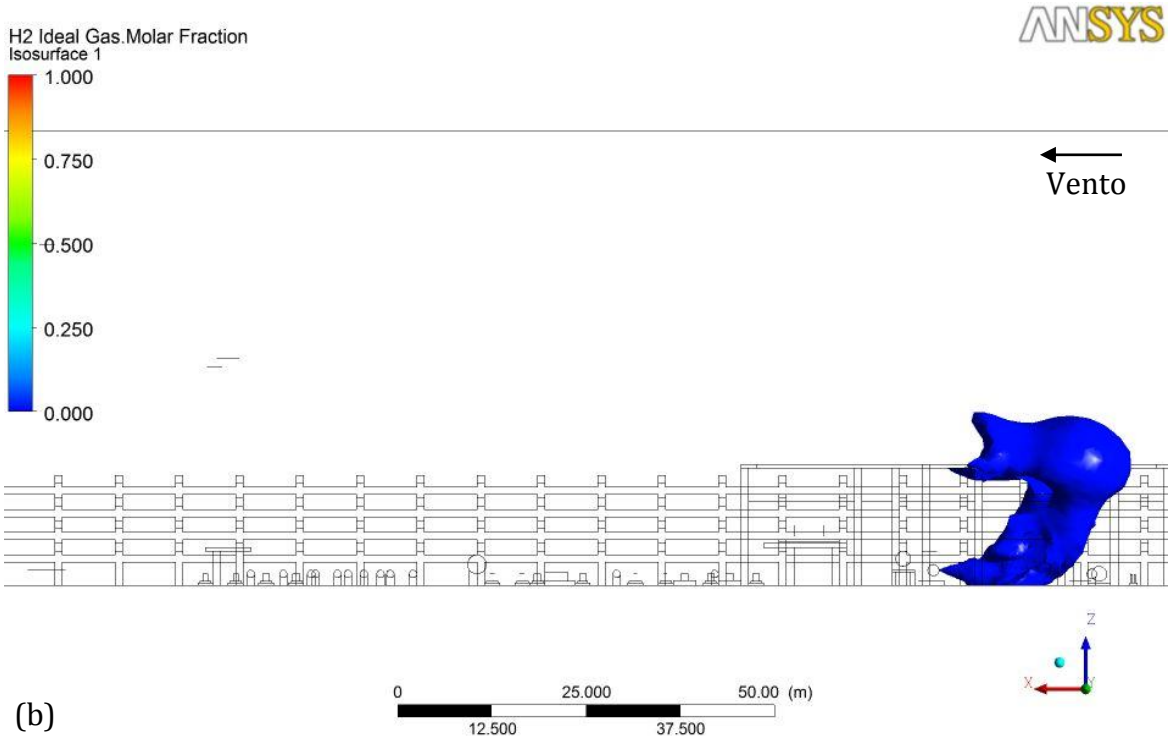


Figura 87: Cenário 16: Vento oeste, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

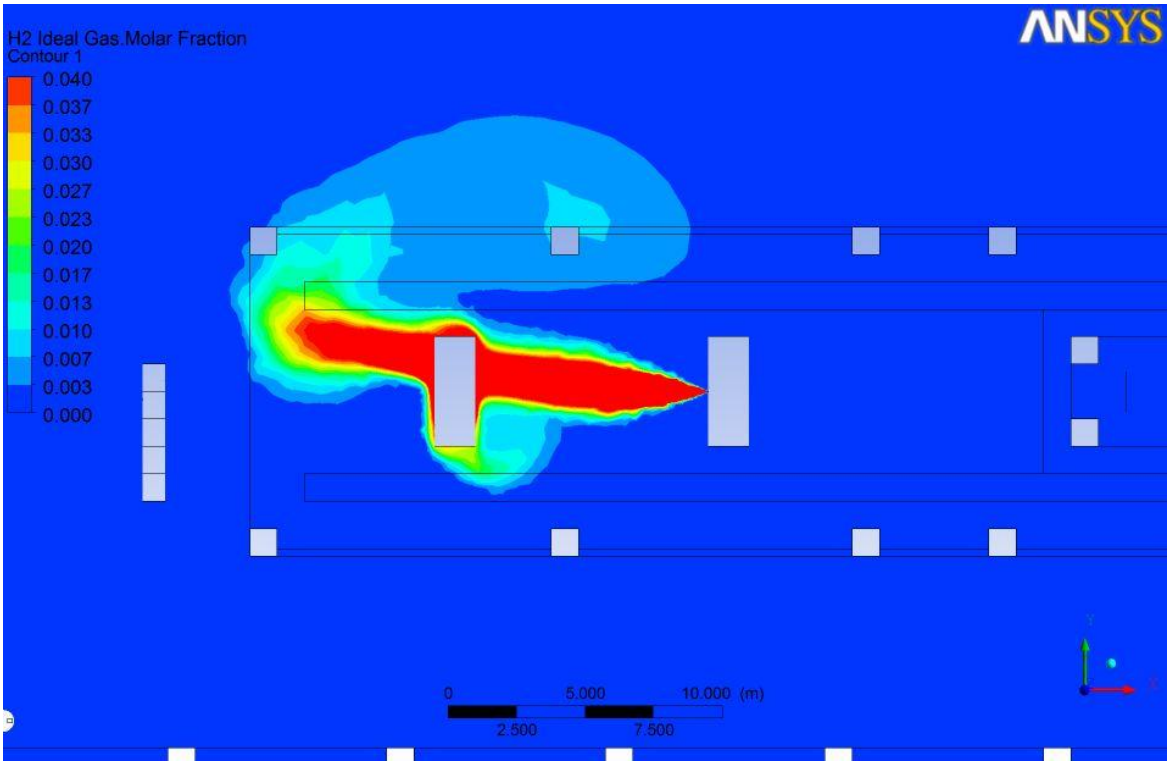


Figura 88: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento oeste (cenário 16).

Vento Nordeste

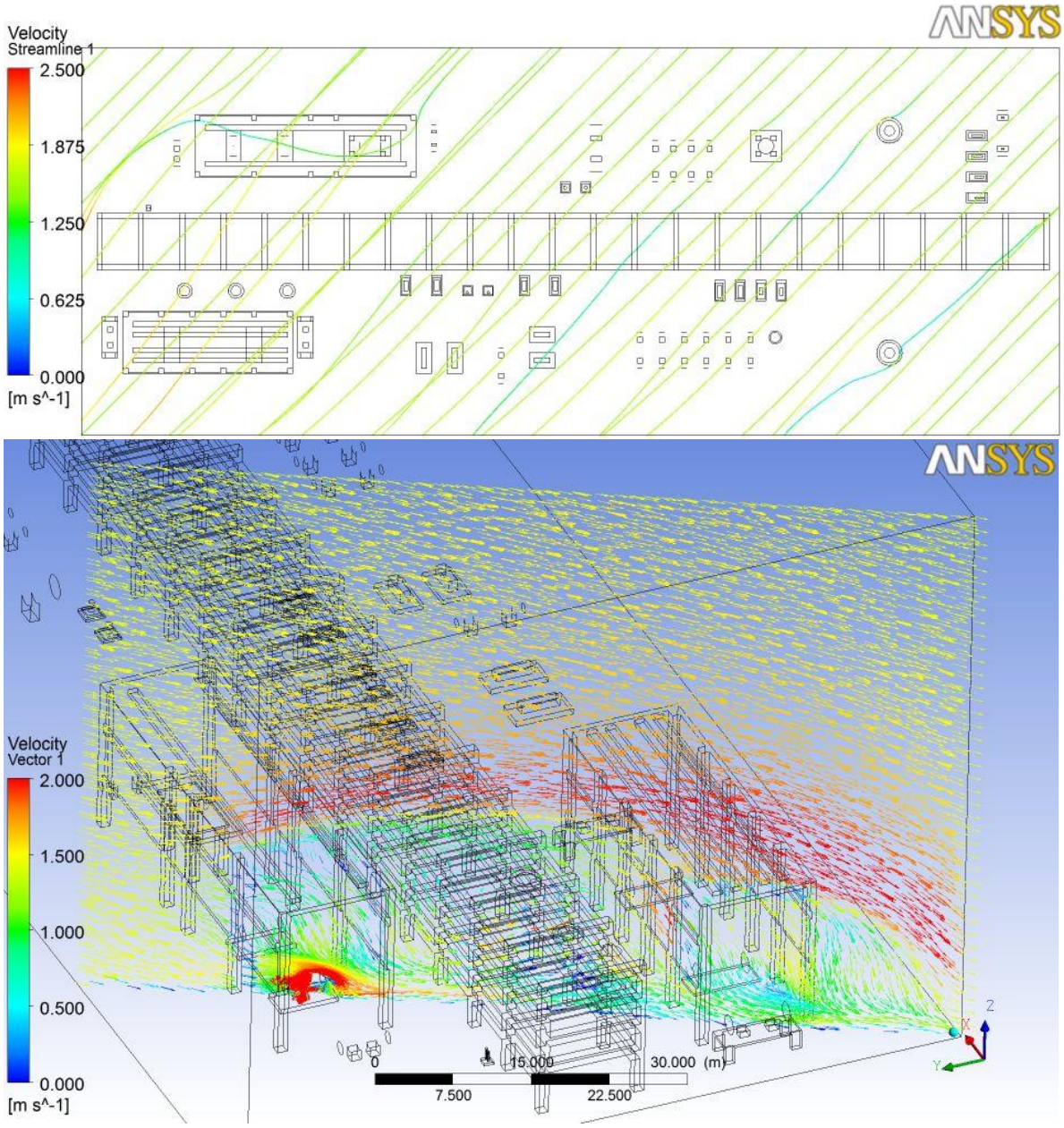


Figura 89: Campo de escoamento do vento na direção nordeste nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano diagonal).

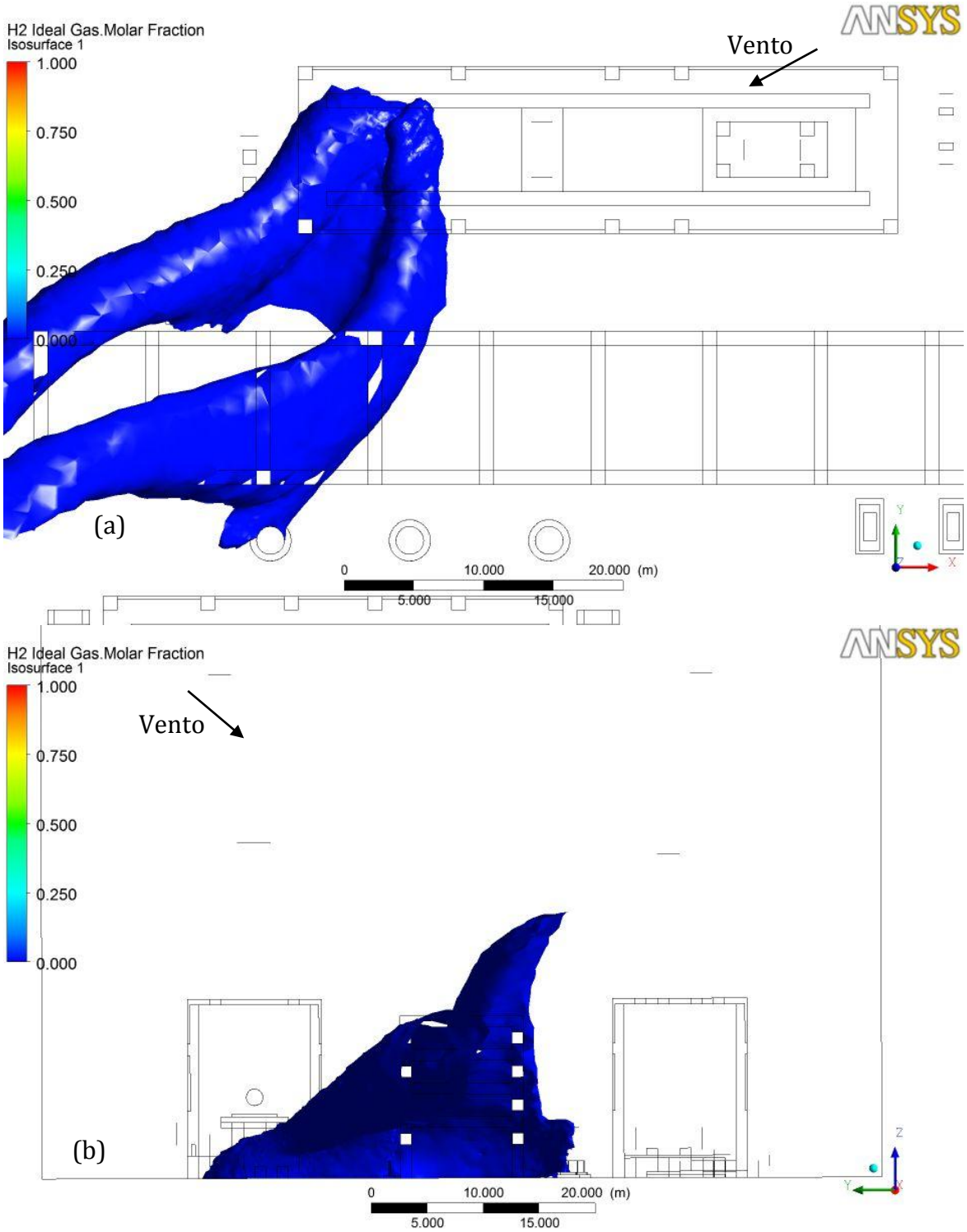


Figura 90: Cenário 17: Vento nordeste, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

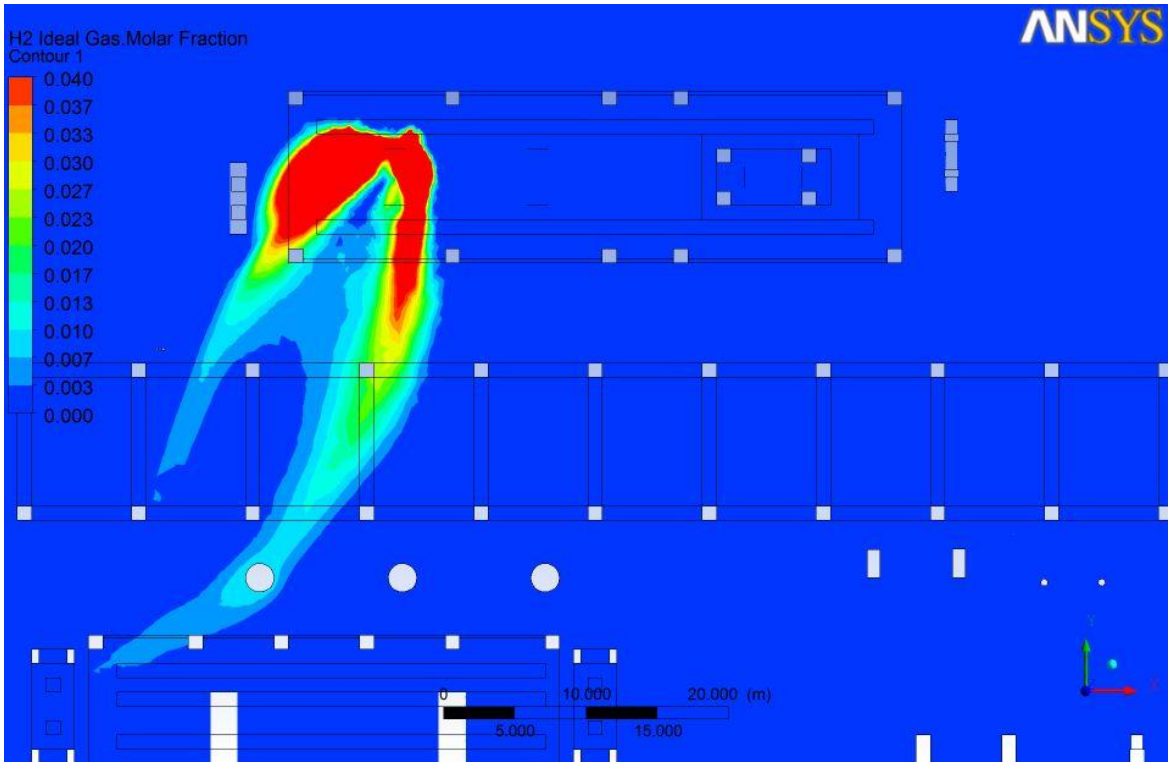
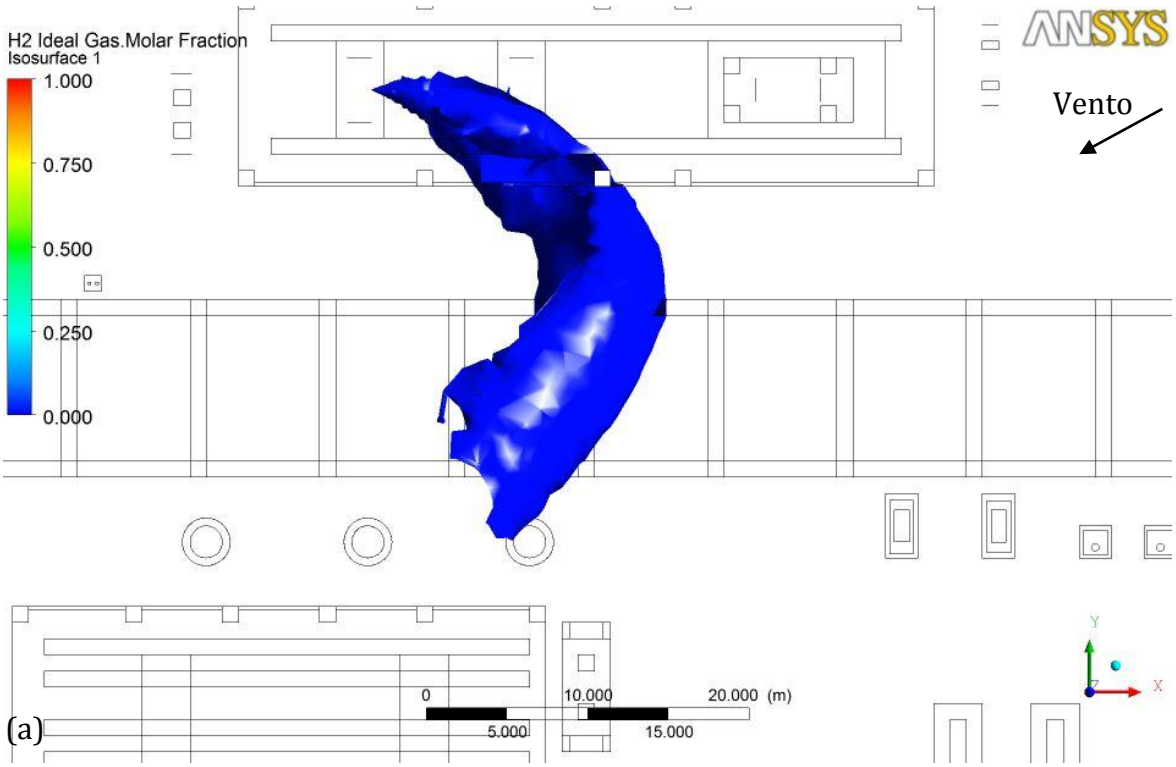


Figura 91: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento nordeste (cenário 17).



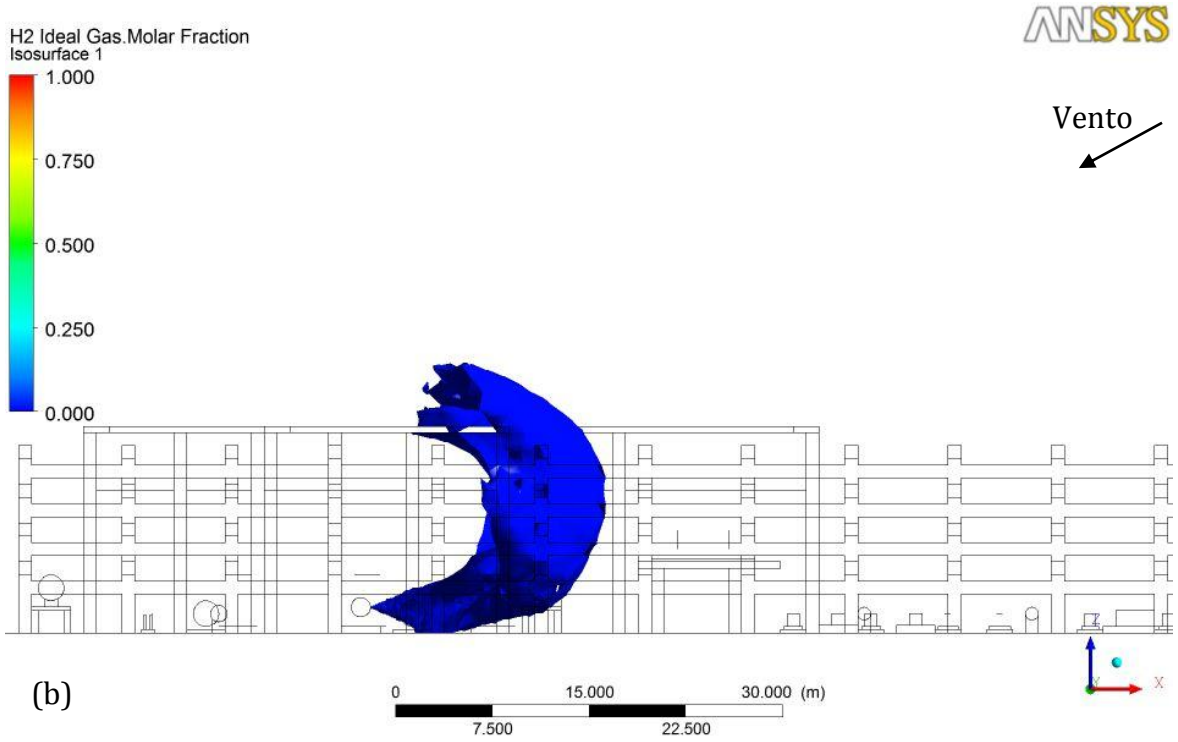


Figura 92: Cenário 18: Vento nordeste, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

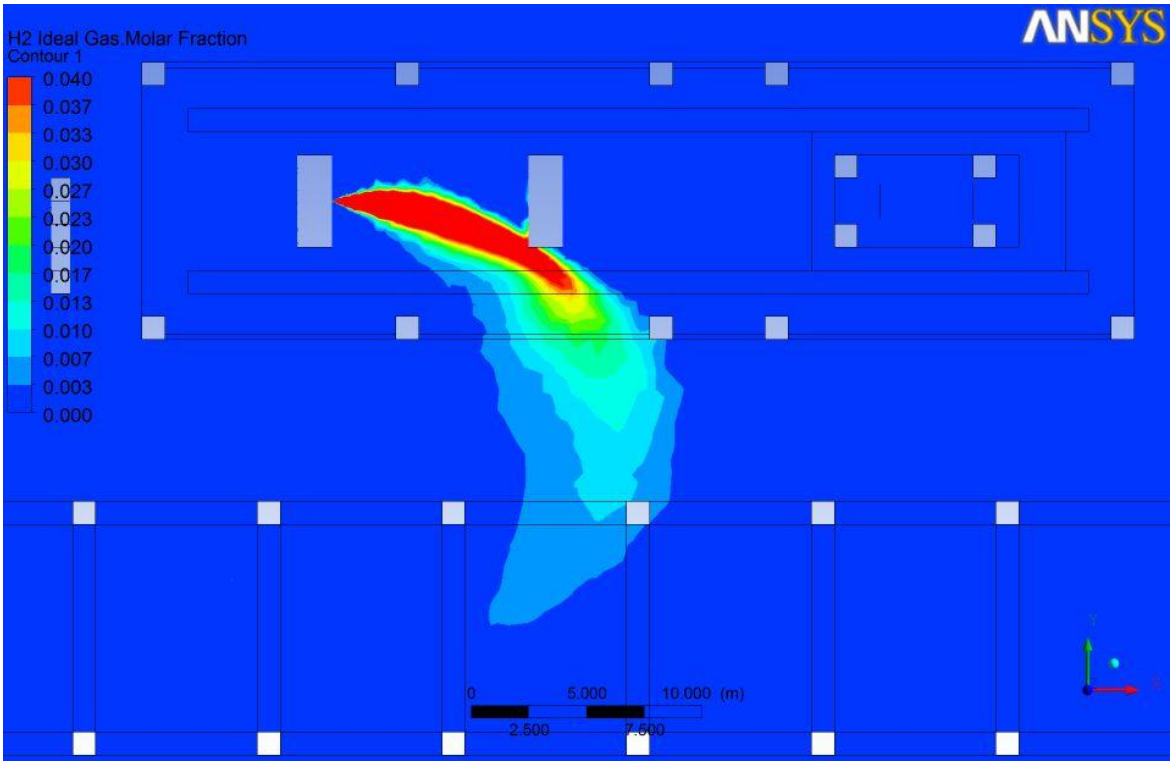


Figura 93: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento nordeste (cenário 18).

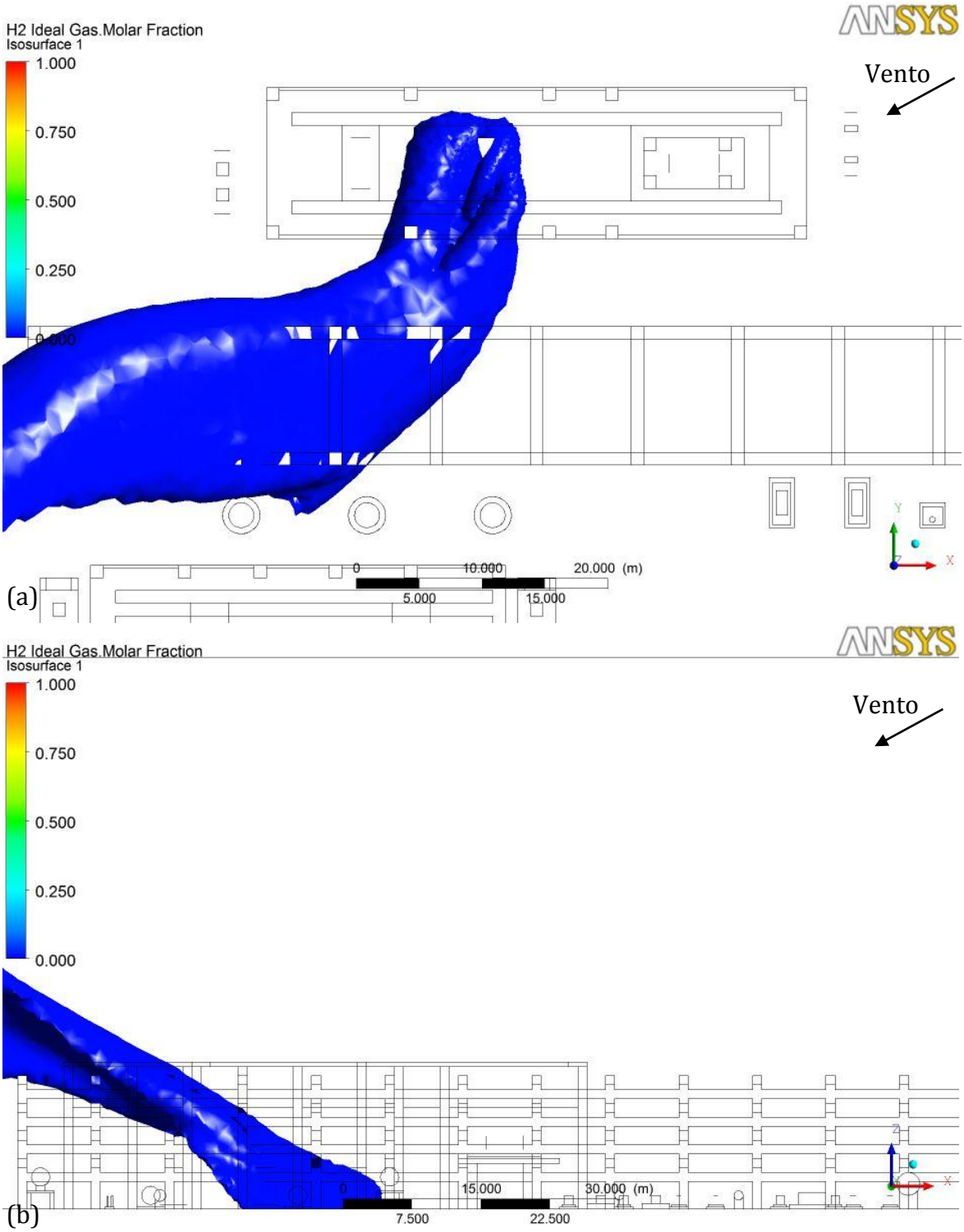


Figura 94: Cenário 19: Vento nordeste, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

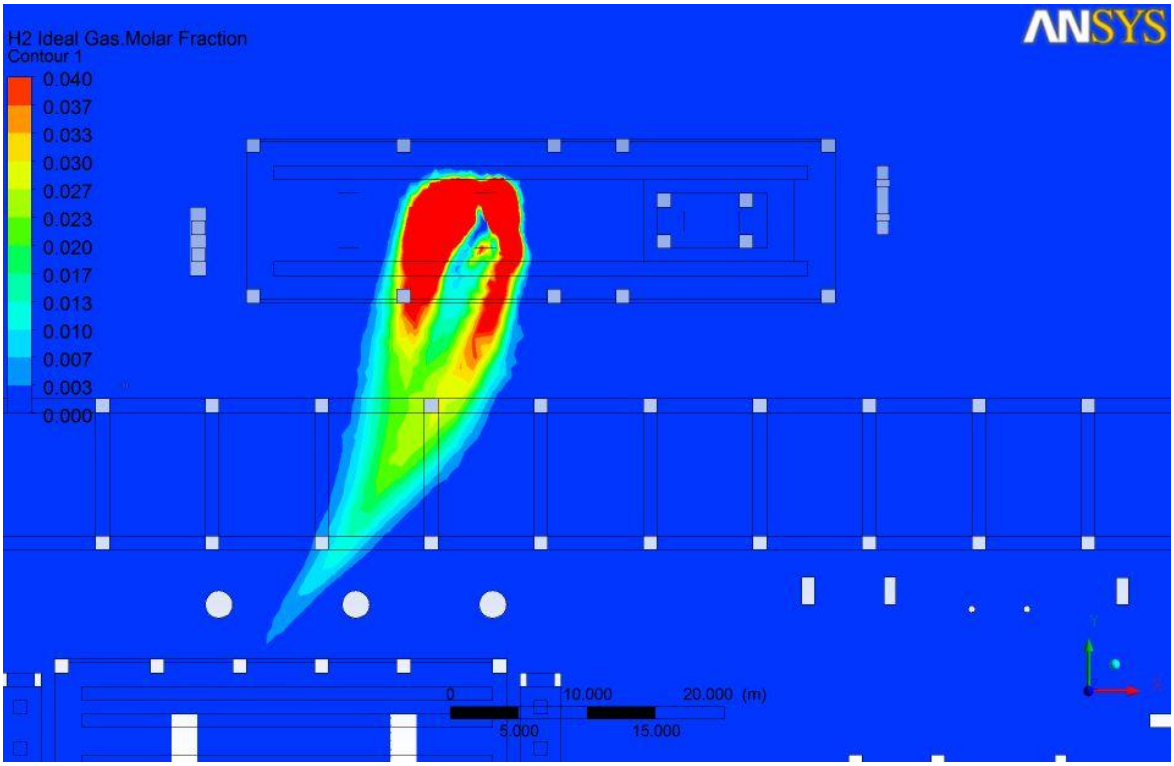
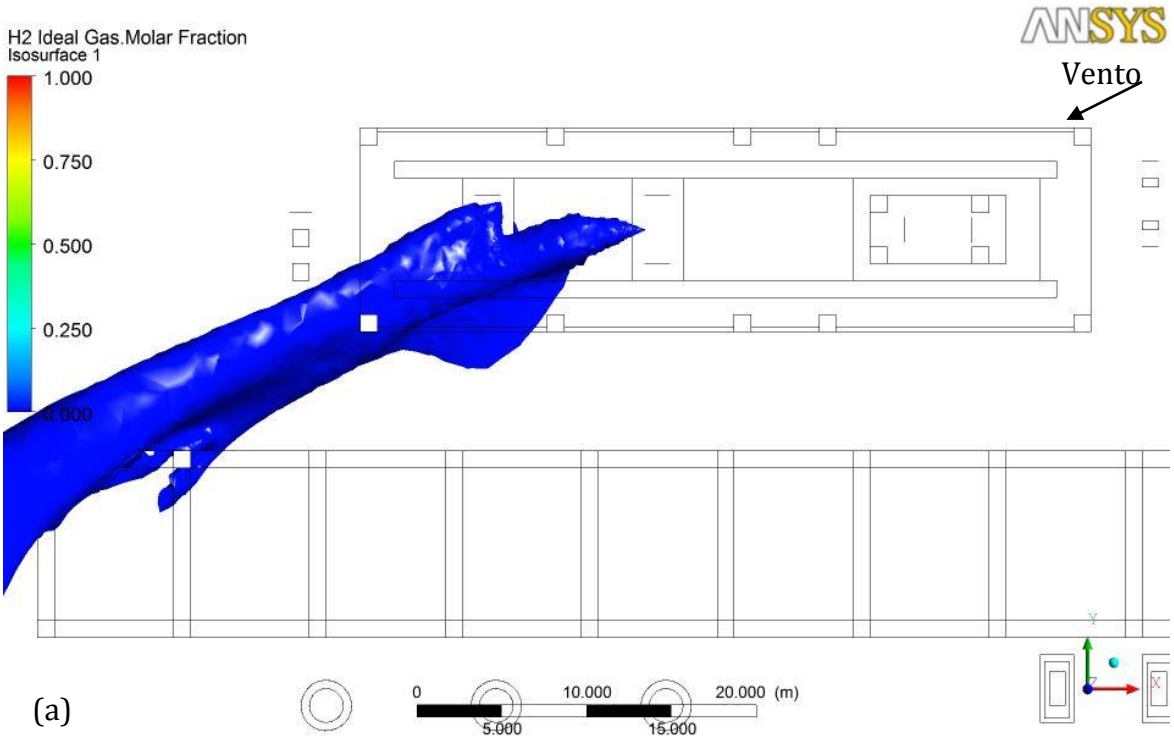


Figura 95: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento nordeste (cenário 19).



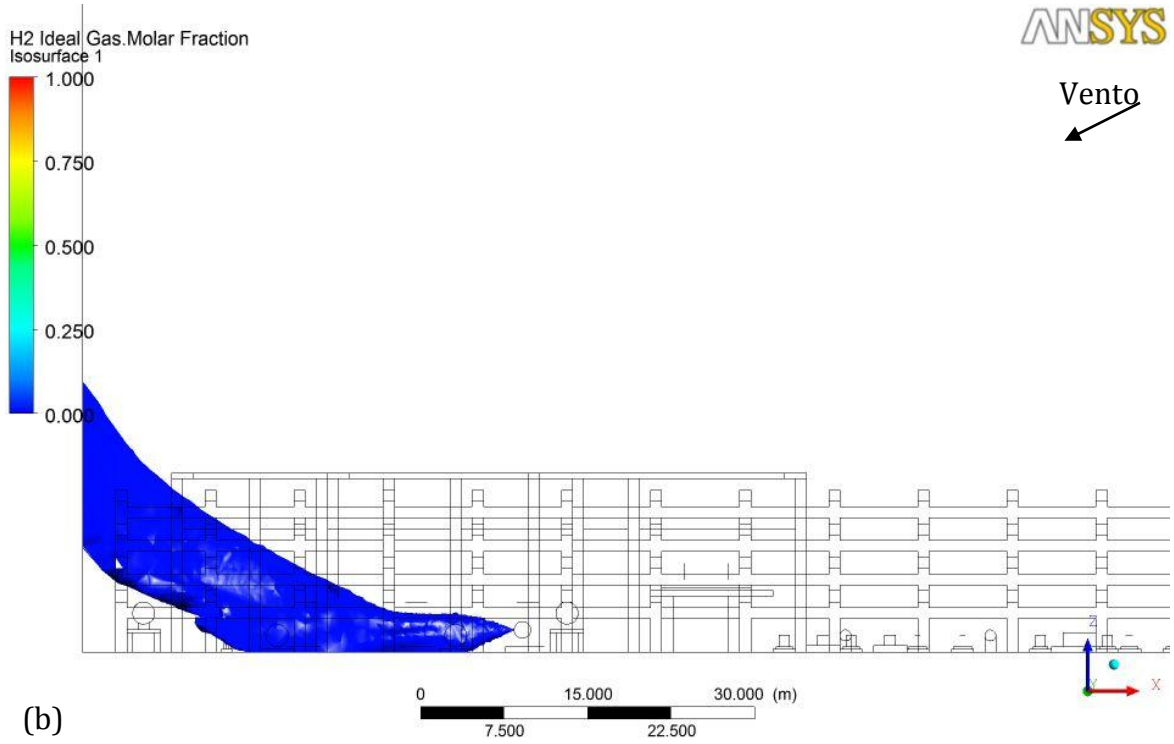


Figura 96: Cenário 20: Vento nordeste, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

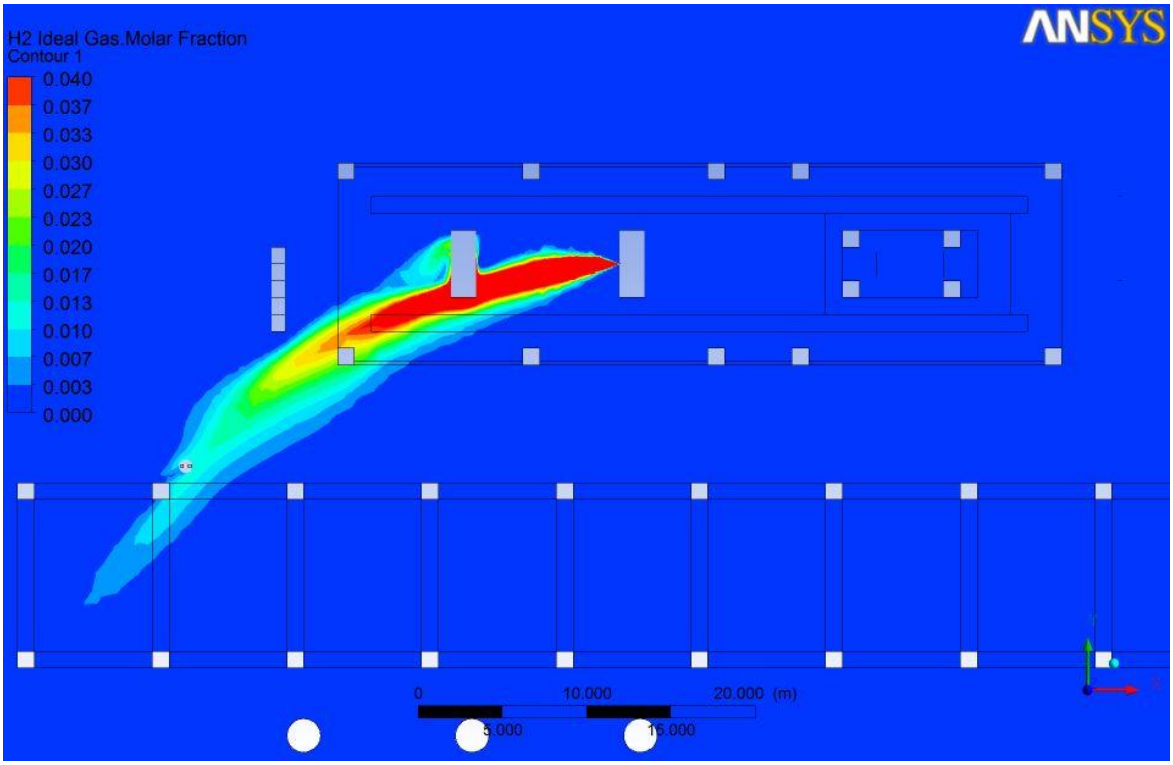


Figura 97: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento nordeste (cenário 20).

Vento Noroeste

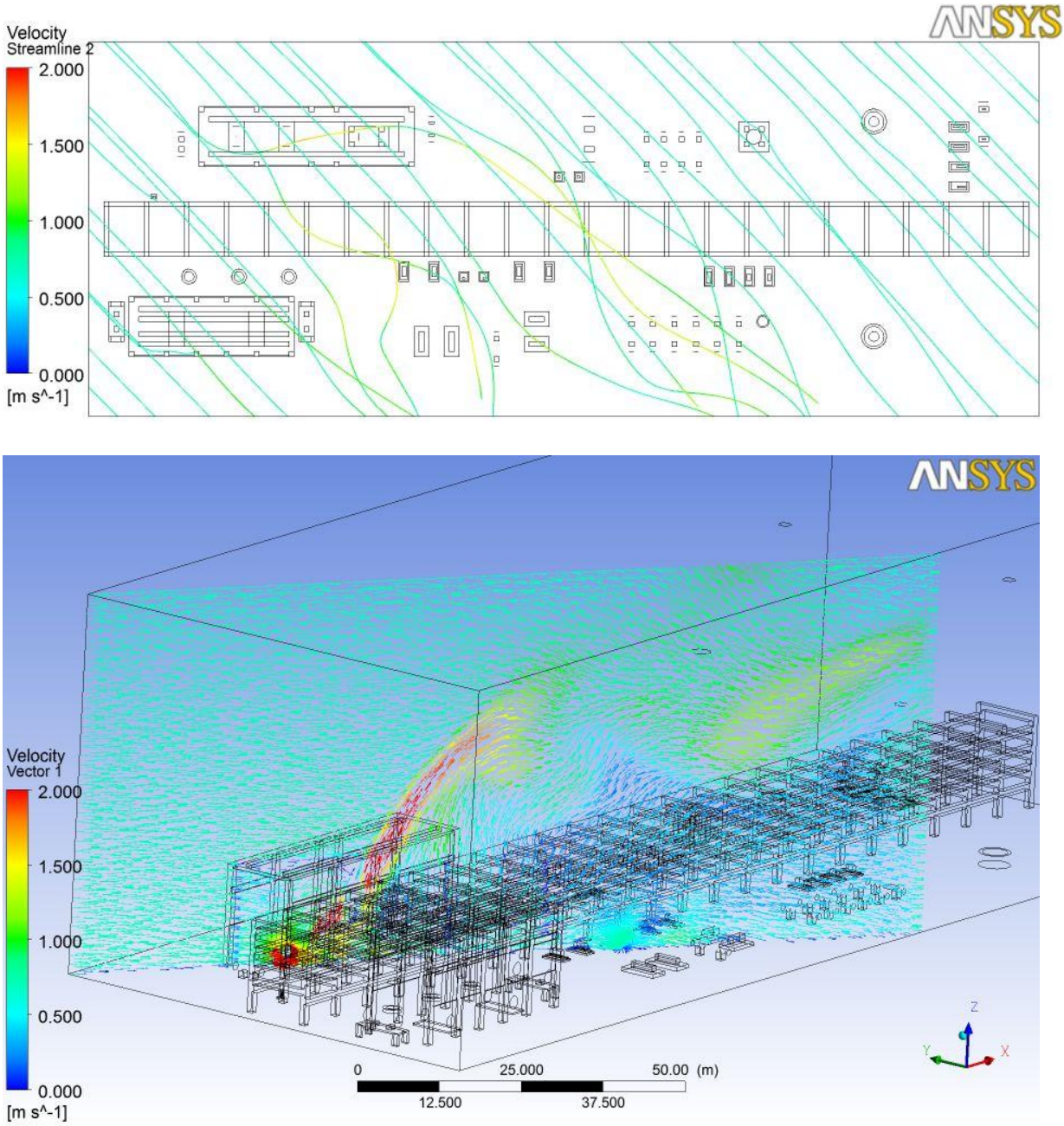


Figura 98: Campo de escoamento do vento na direção noroeste nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano diagonal).

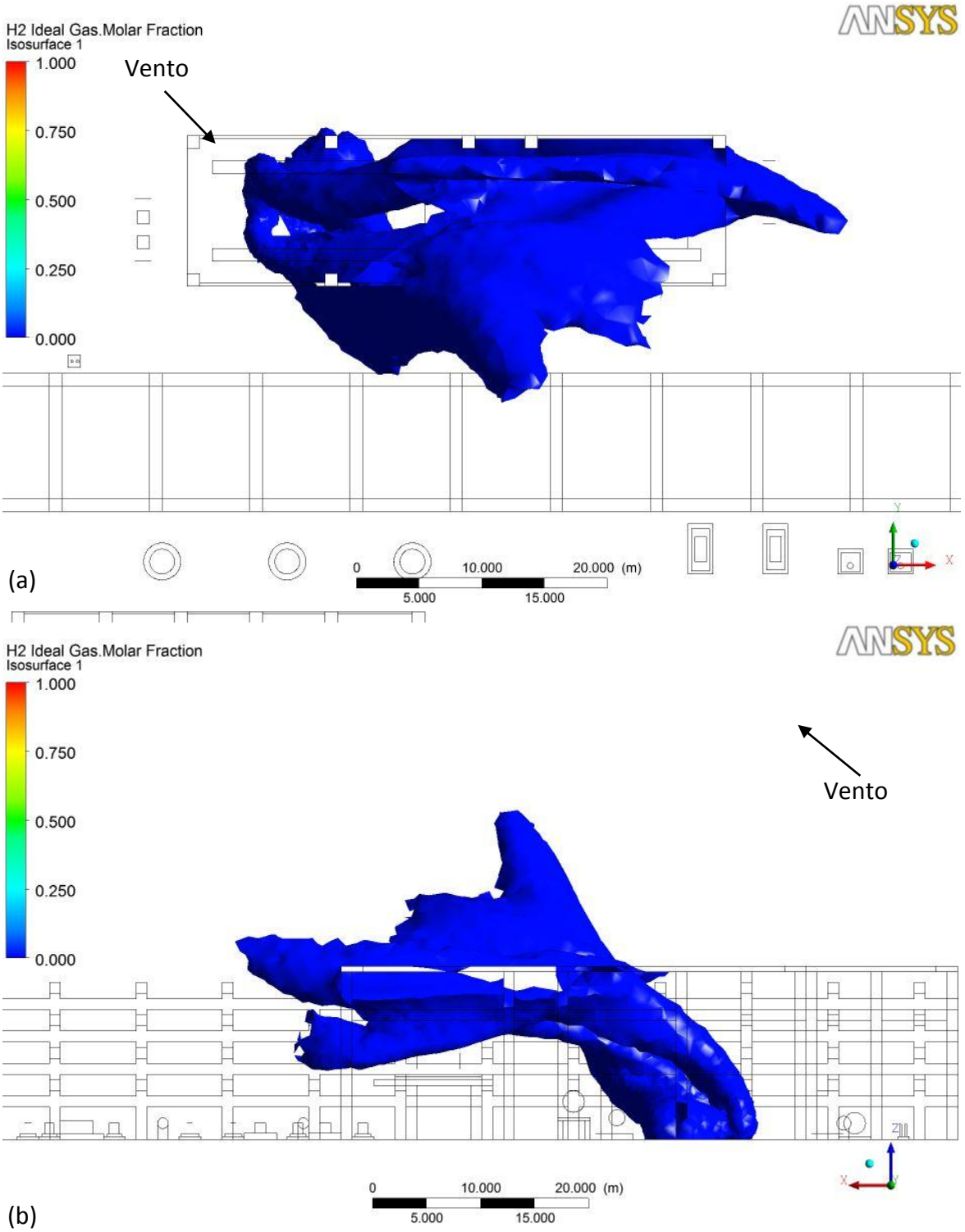


Figura 99: Cenário 21: Vento noroeste, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

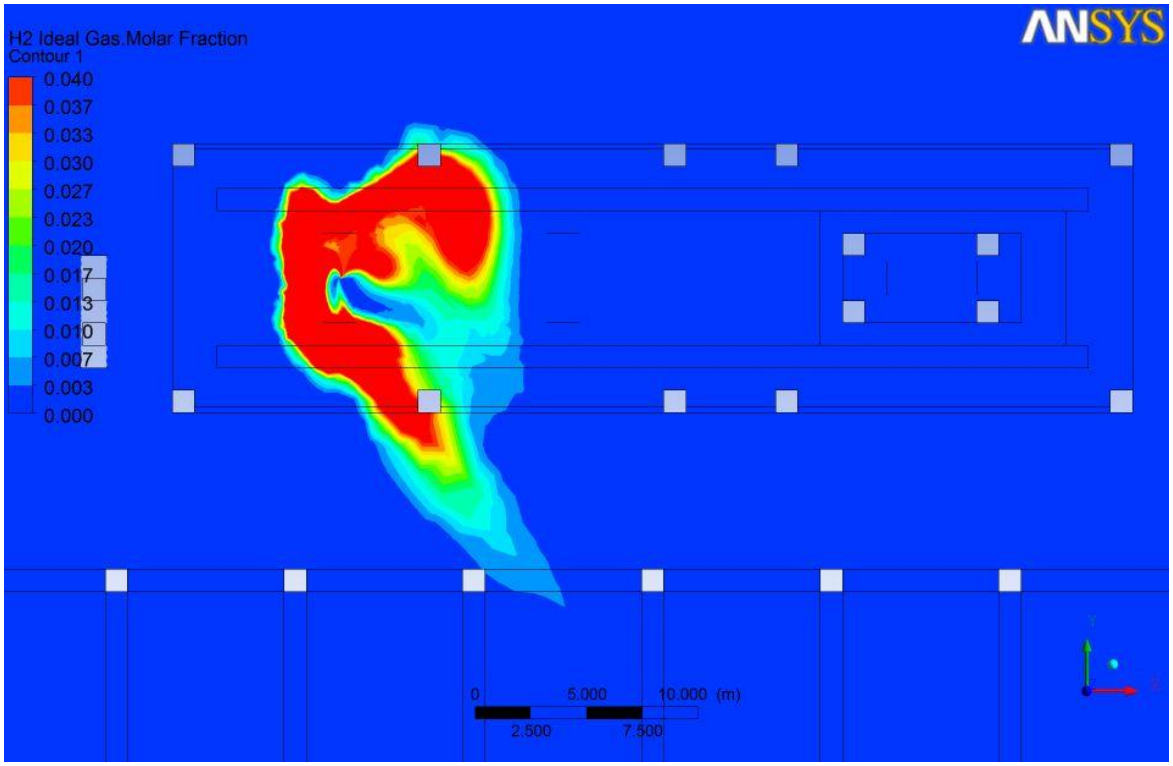
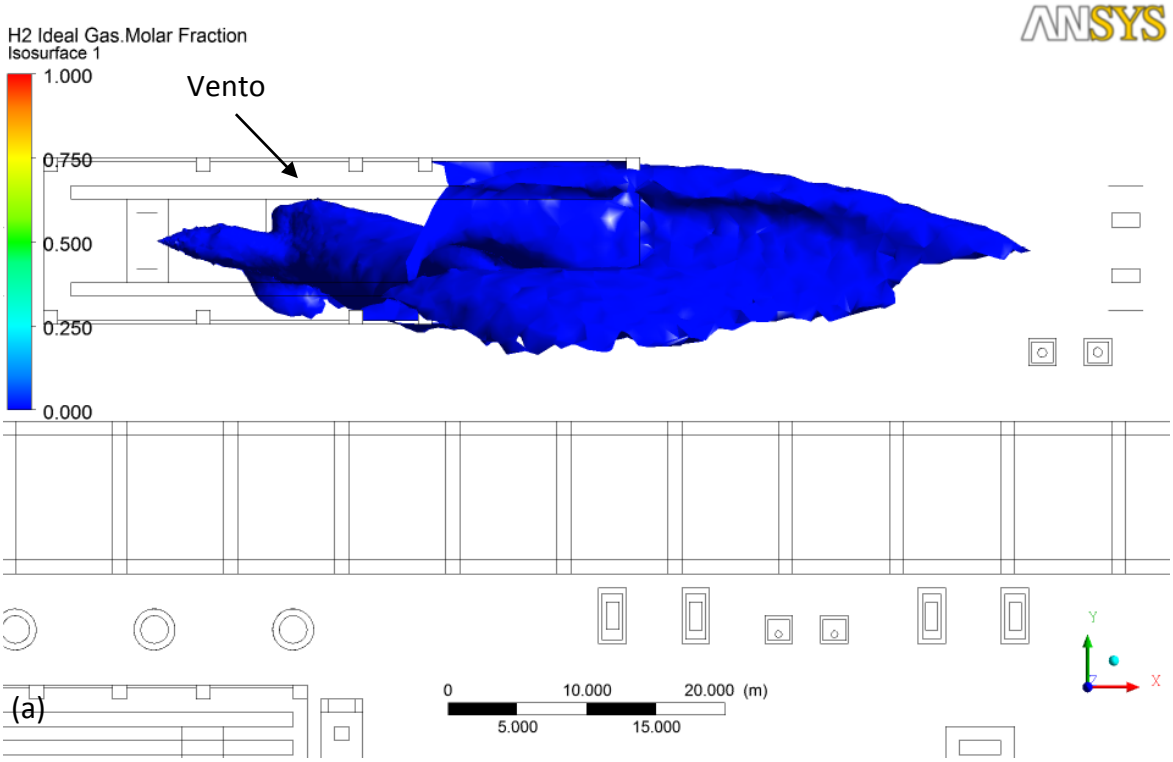


Figura 100: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento noroeste (cenário 21).



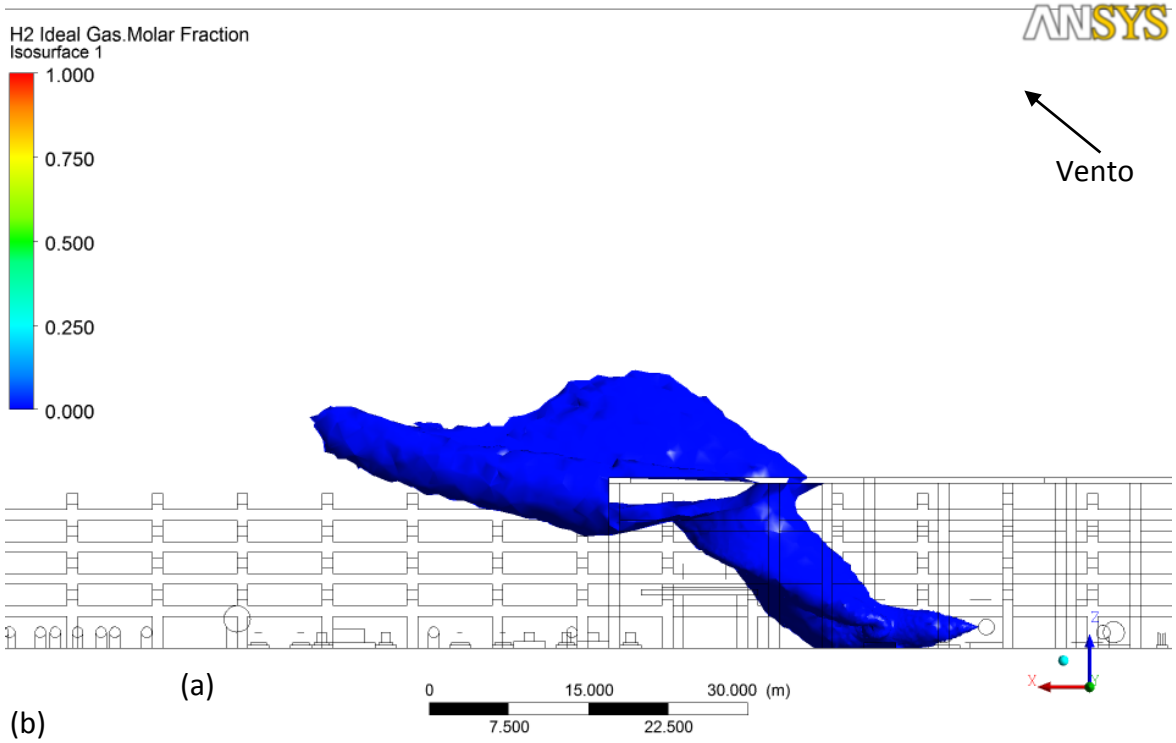


Figura 101: Cenário 22: Vento noroeste, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

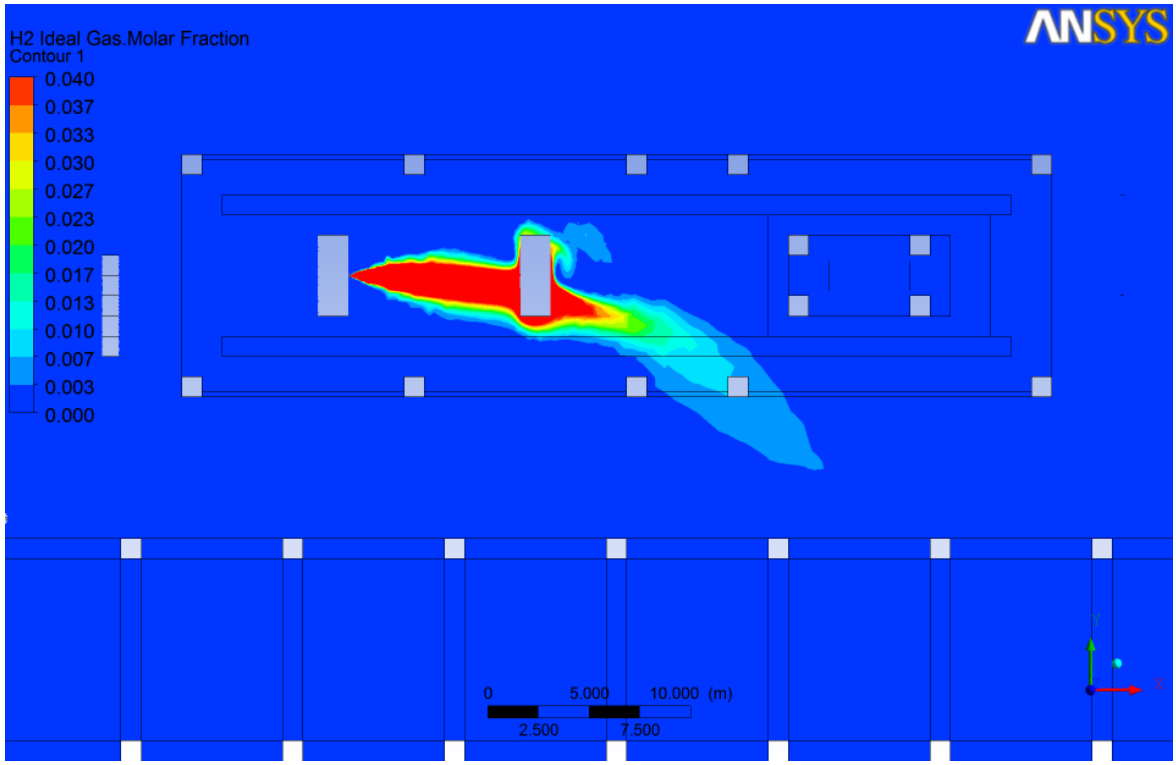


Figura 102: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento noroeste (cenário 22).

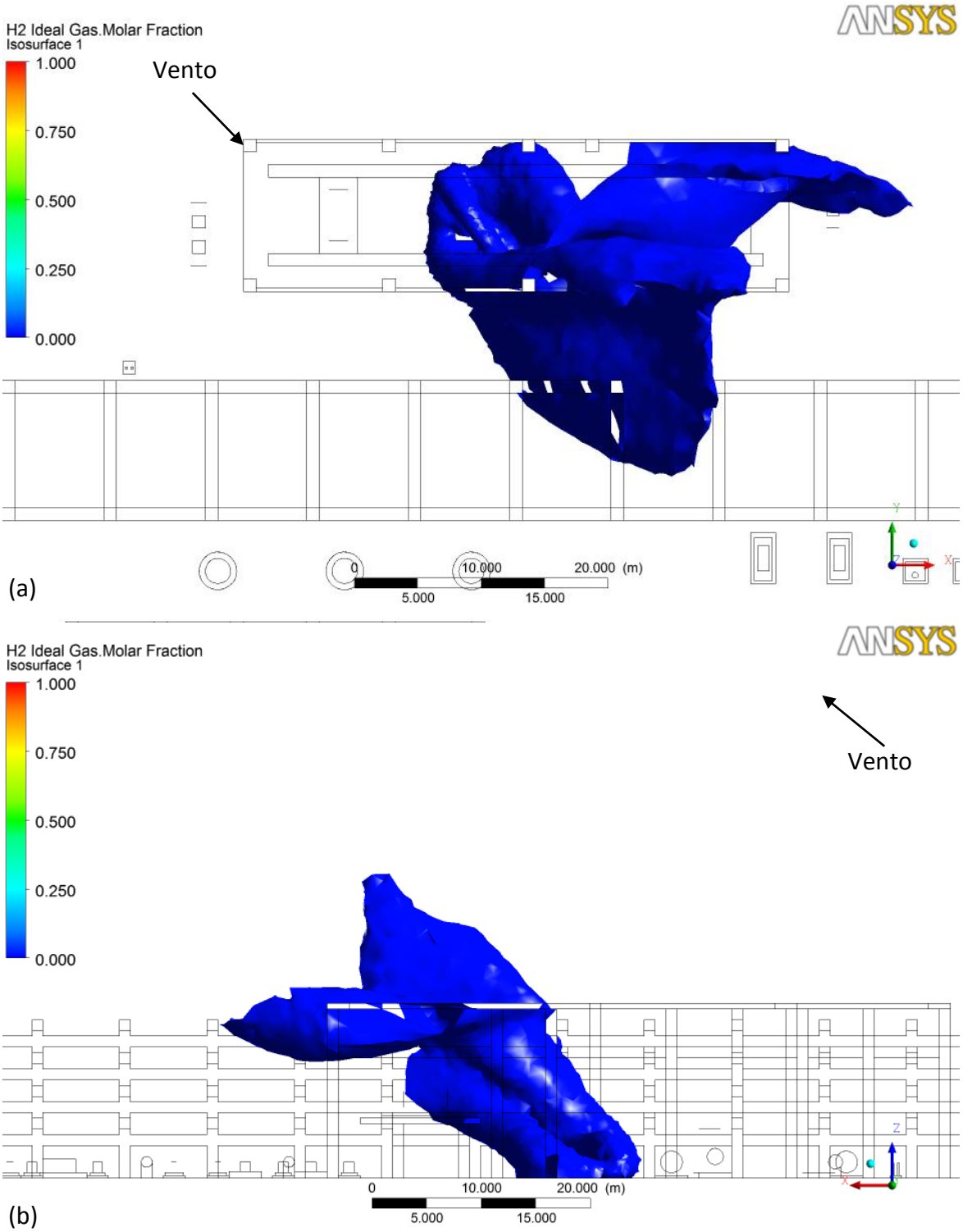


Figura 103: Cenário 23: Vento noroeste, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

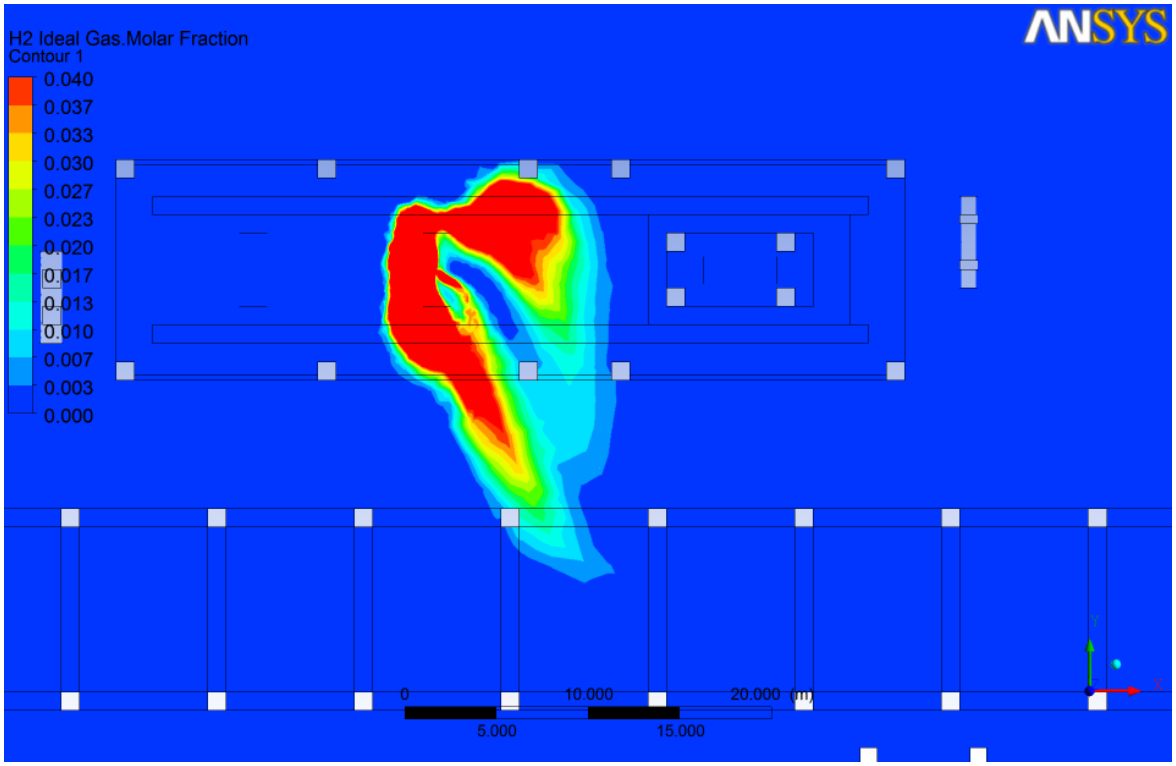
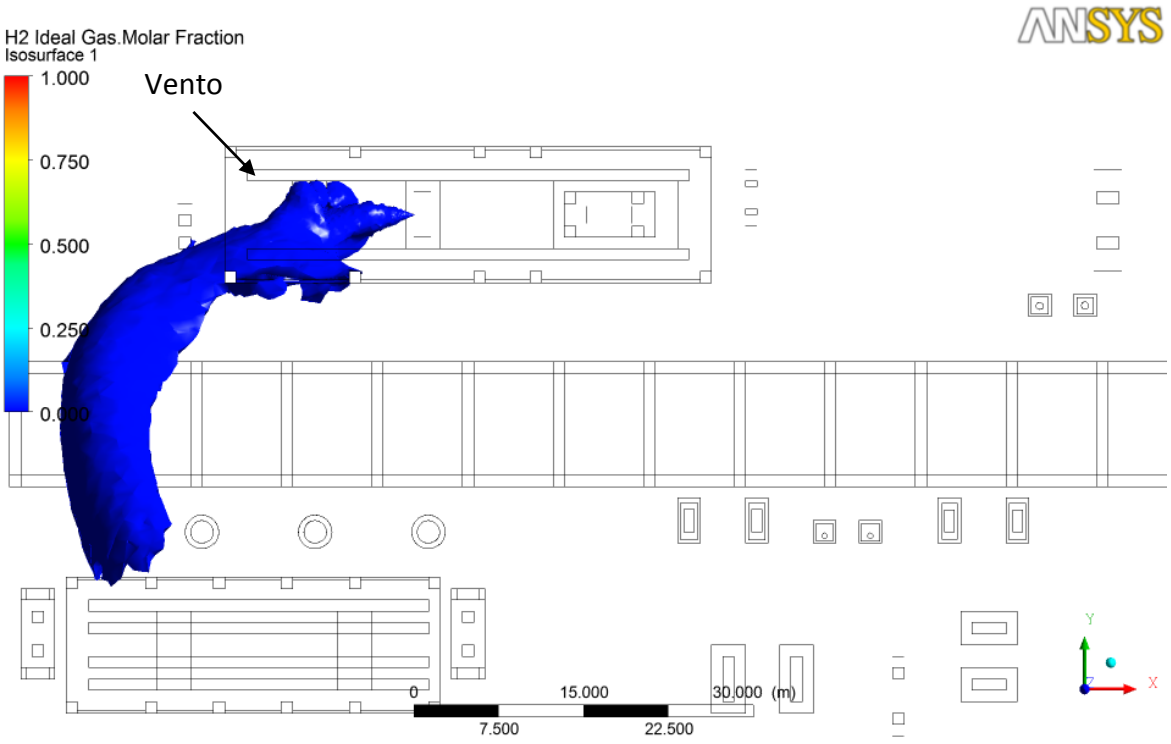


Figura 104: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento noroeste (cenário 23).



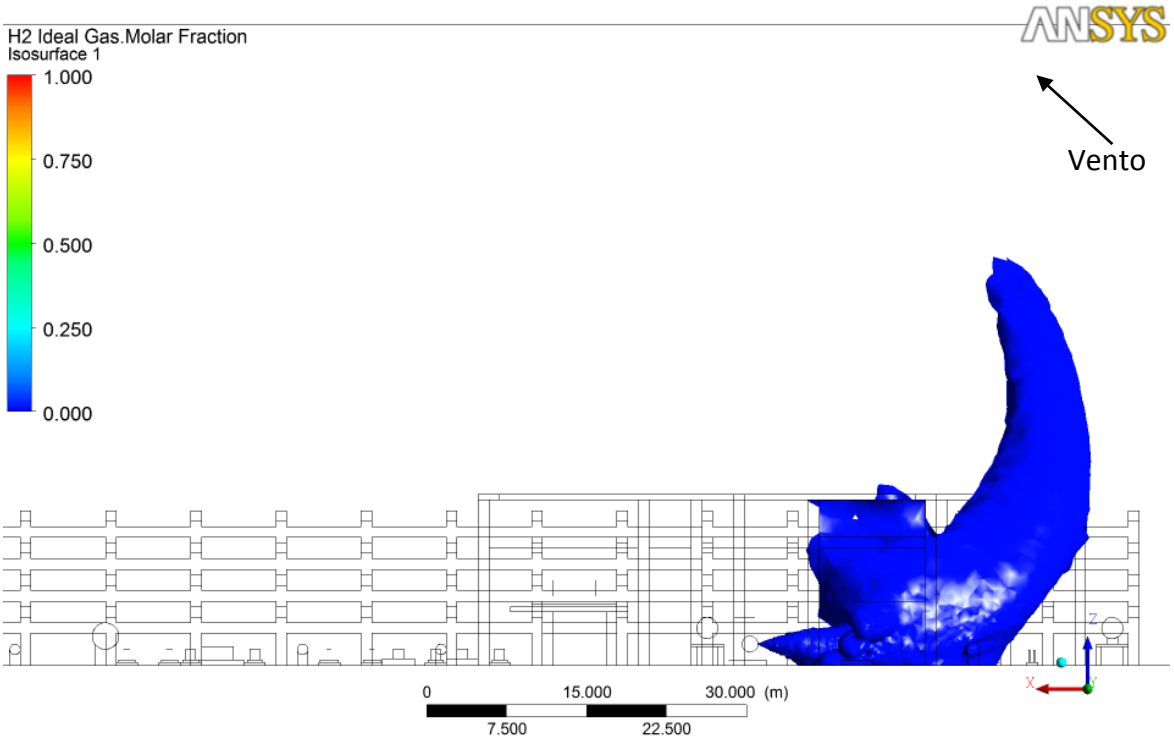


Figura 105: Cenário 24: Vento noroeste, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

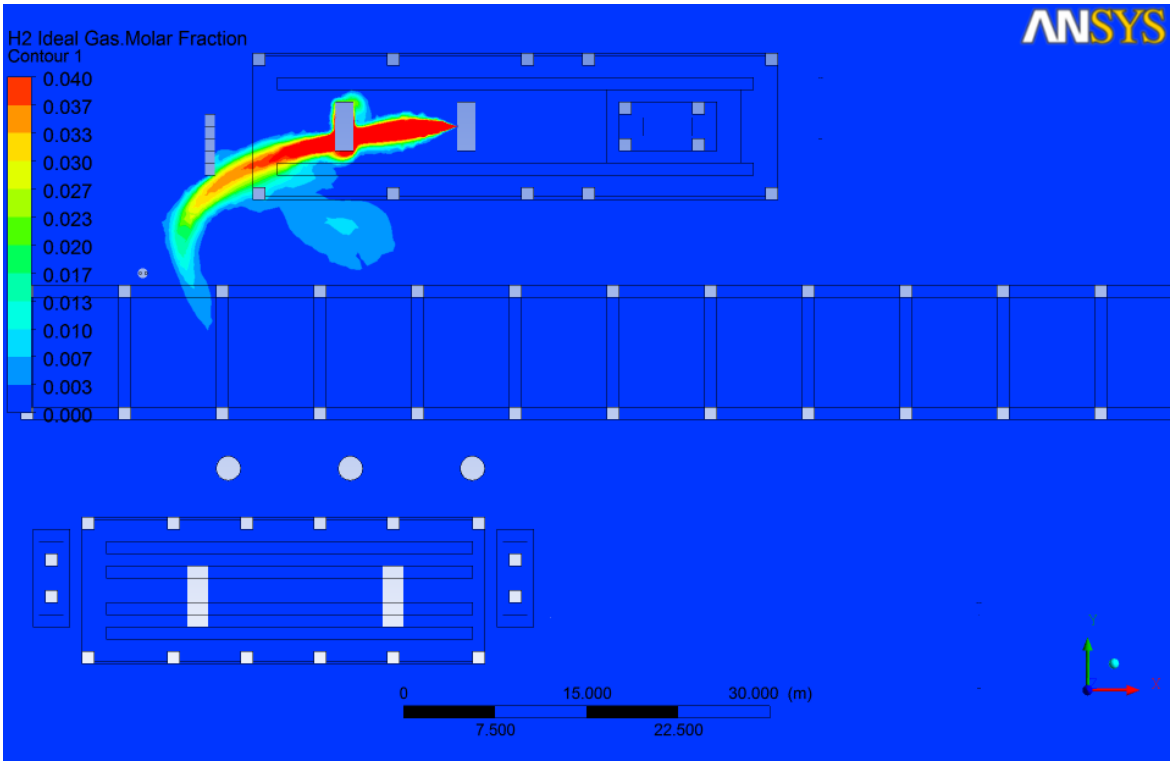


Figura 106: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento noroeste (cenário 24).

Vento Sudeste

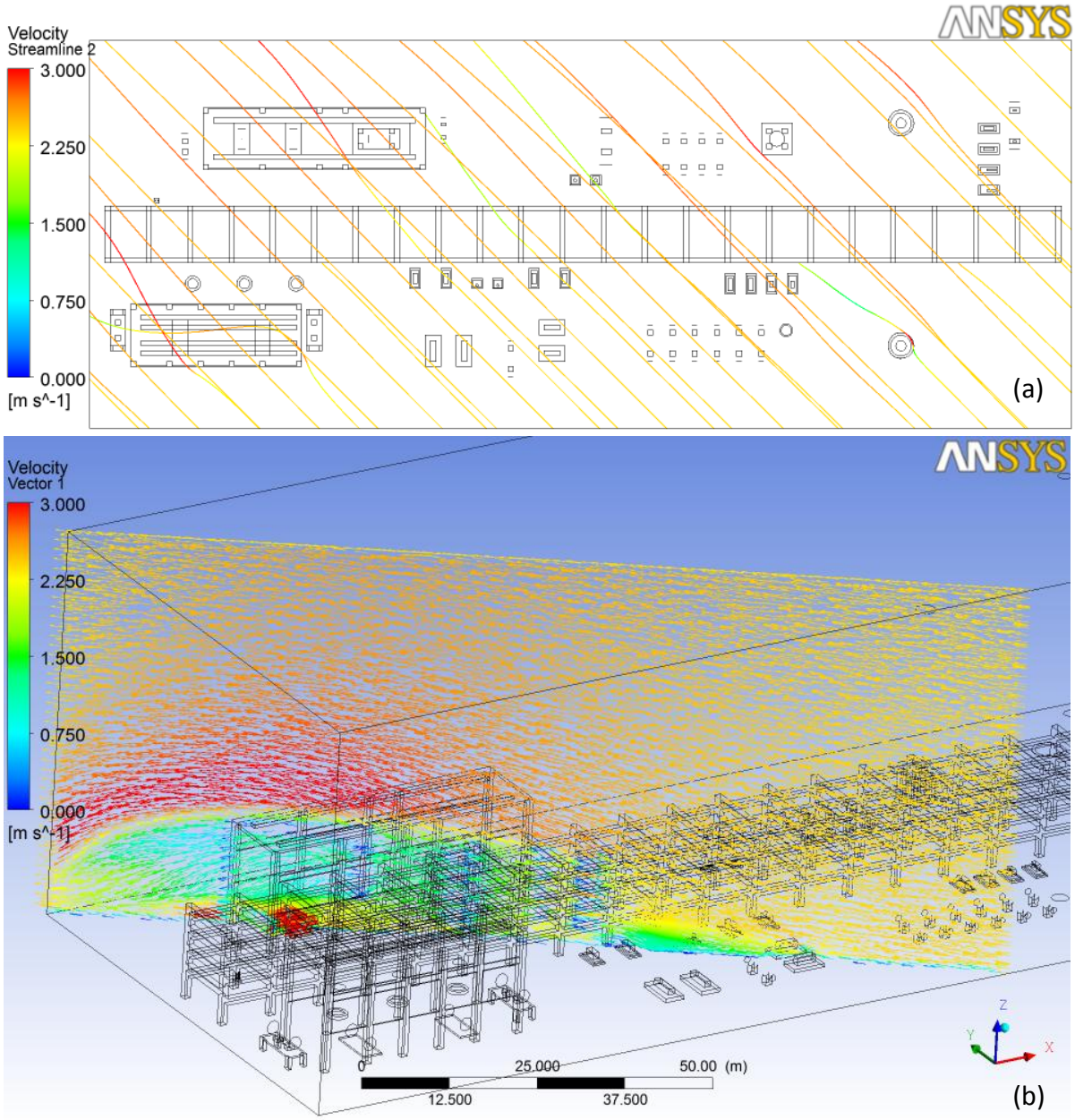


Figura 107: Campo de escoamento do vento na direção sudeste nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano diagonal).

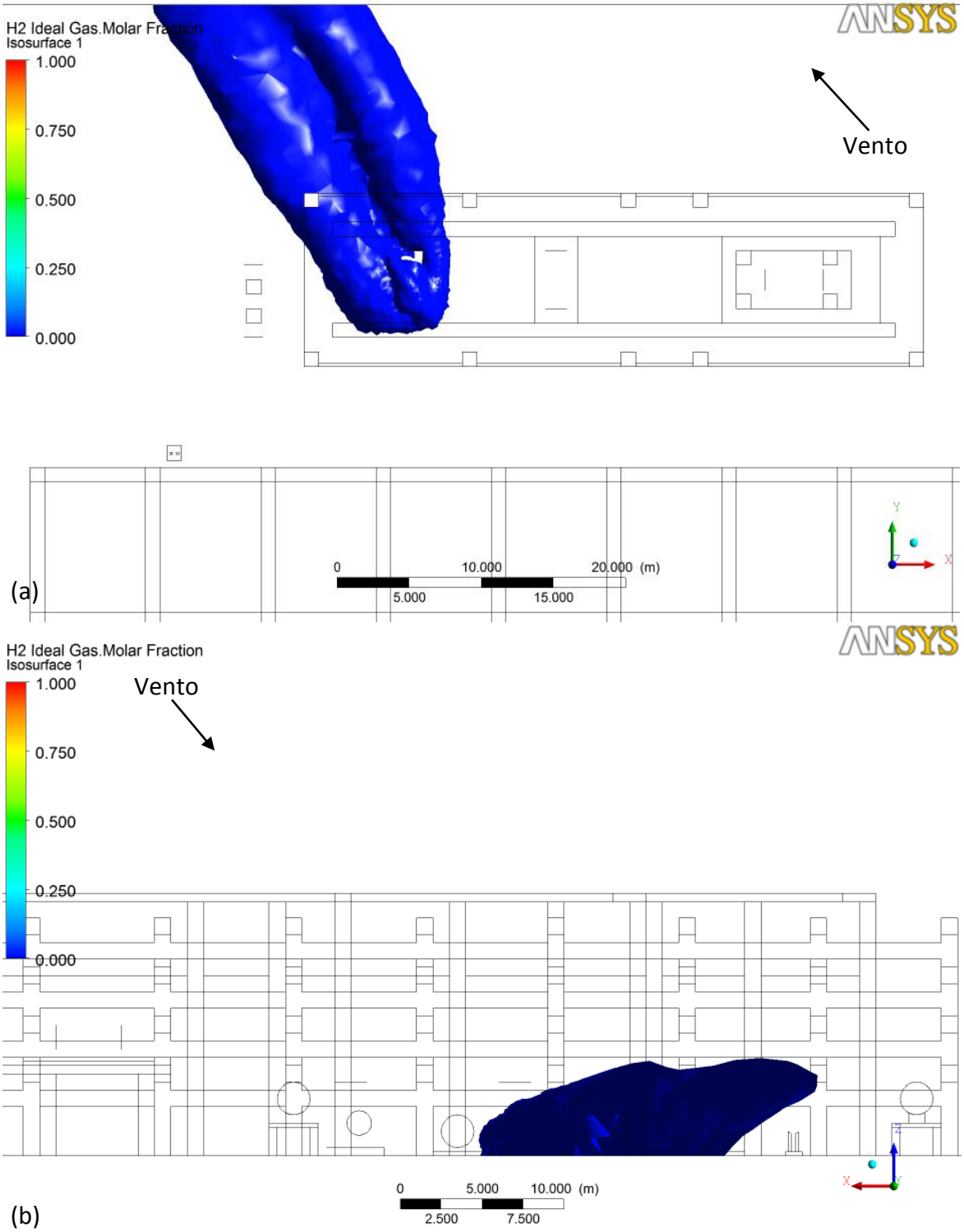


Figura 108: Cenário 25: Vento sudeste, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

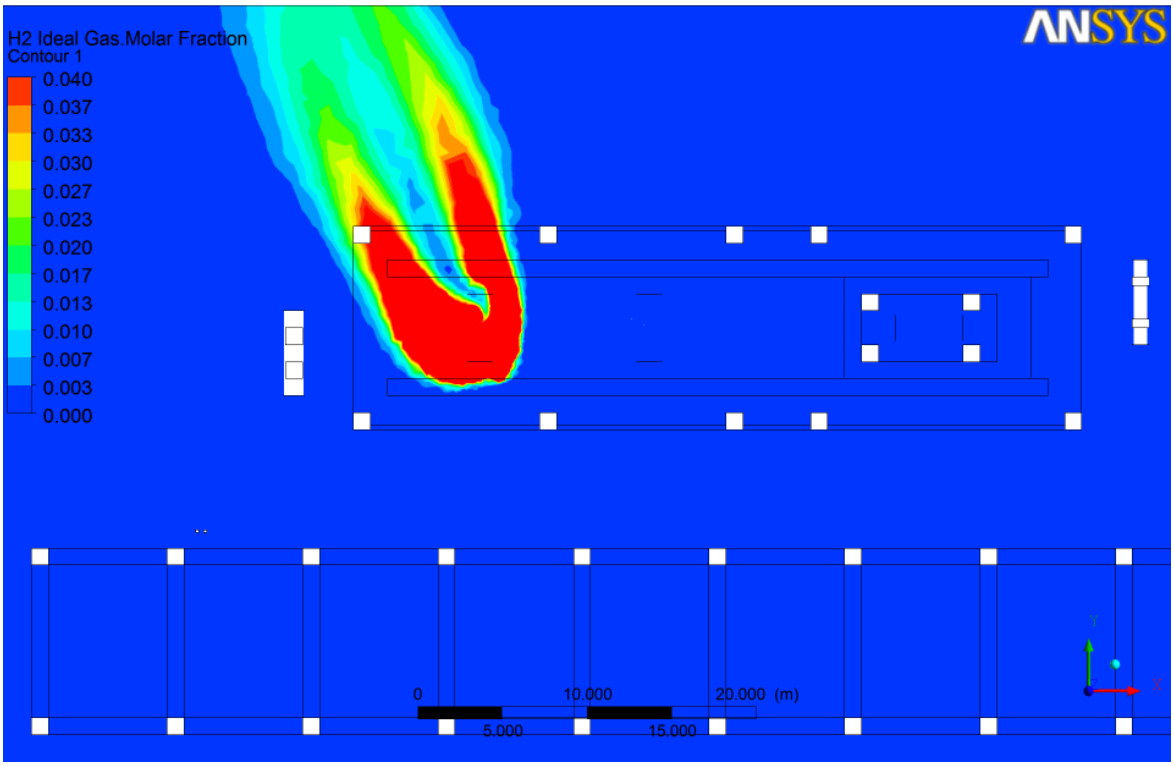
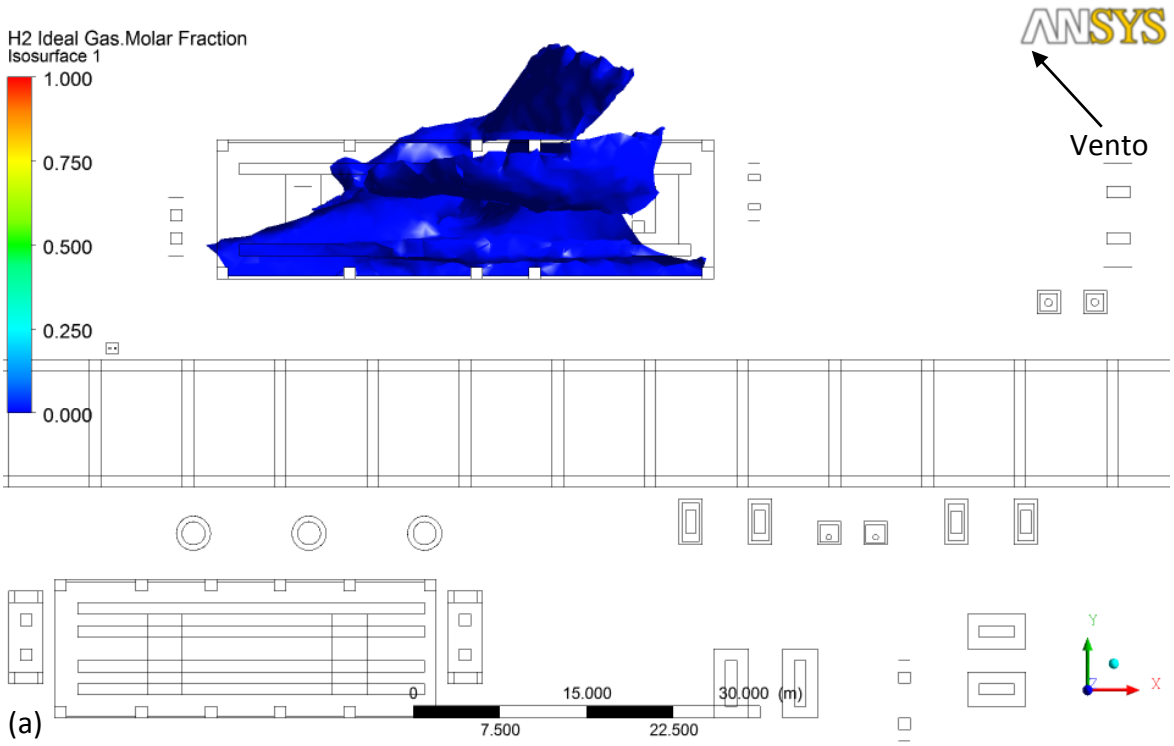


Figura 109: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento sudeste (cenário 25).



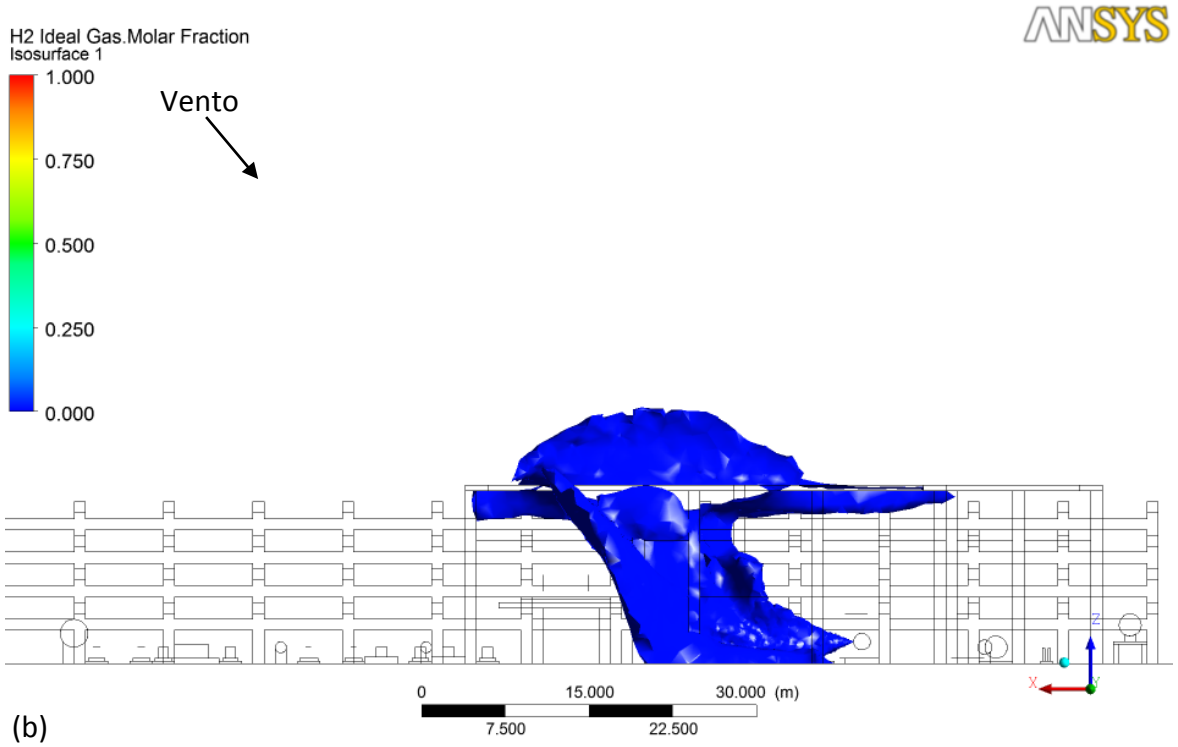


Figura 110: Cenário 26: Vento sudeste, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

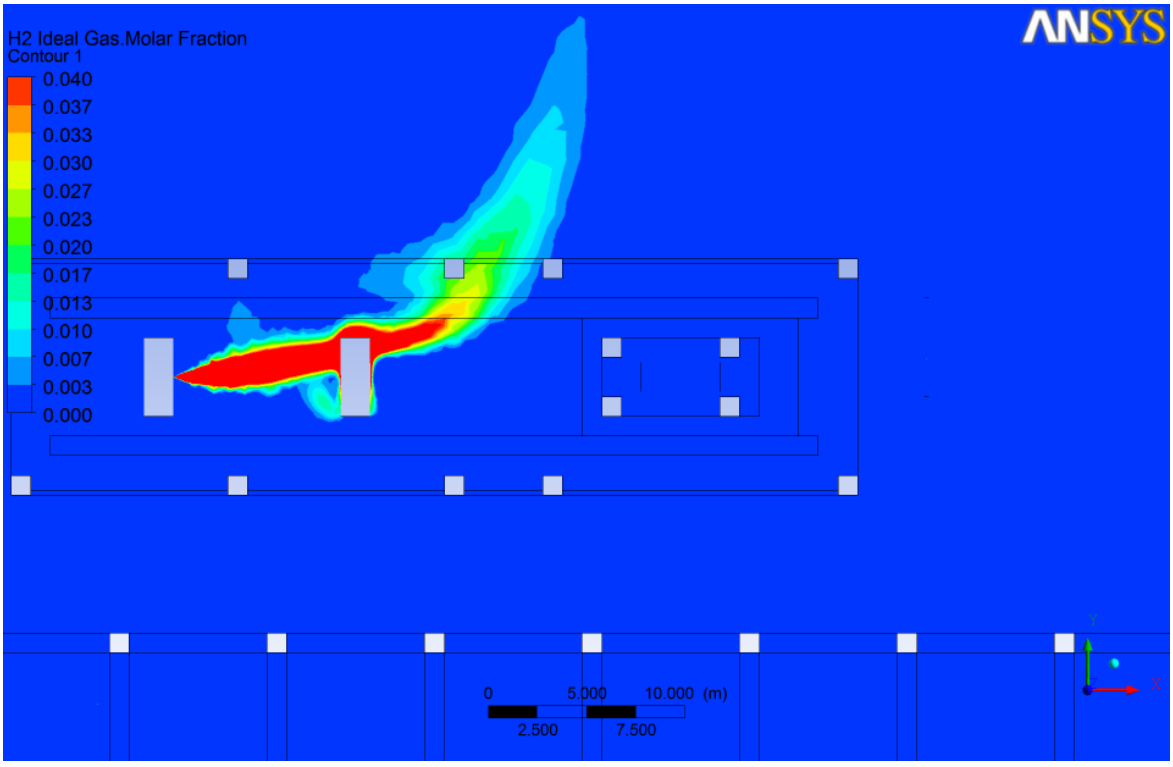


Figura 111: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento sudeste (cenário 26).

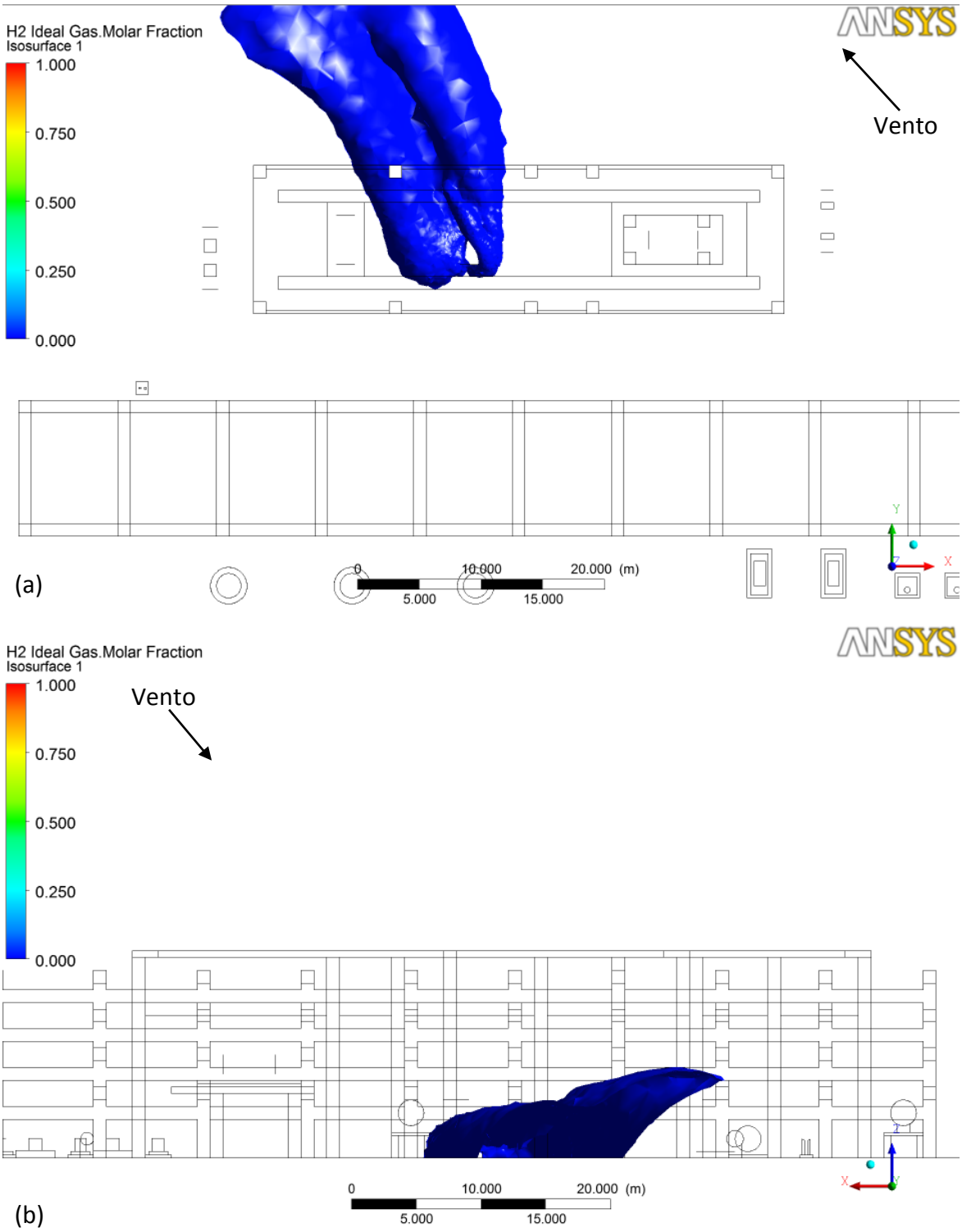


Figura 112: Cenário 27: Vento sudeste, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

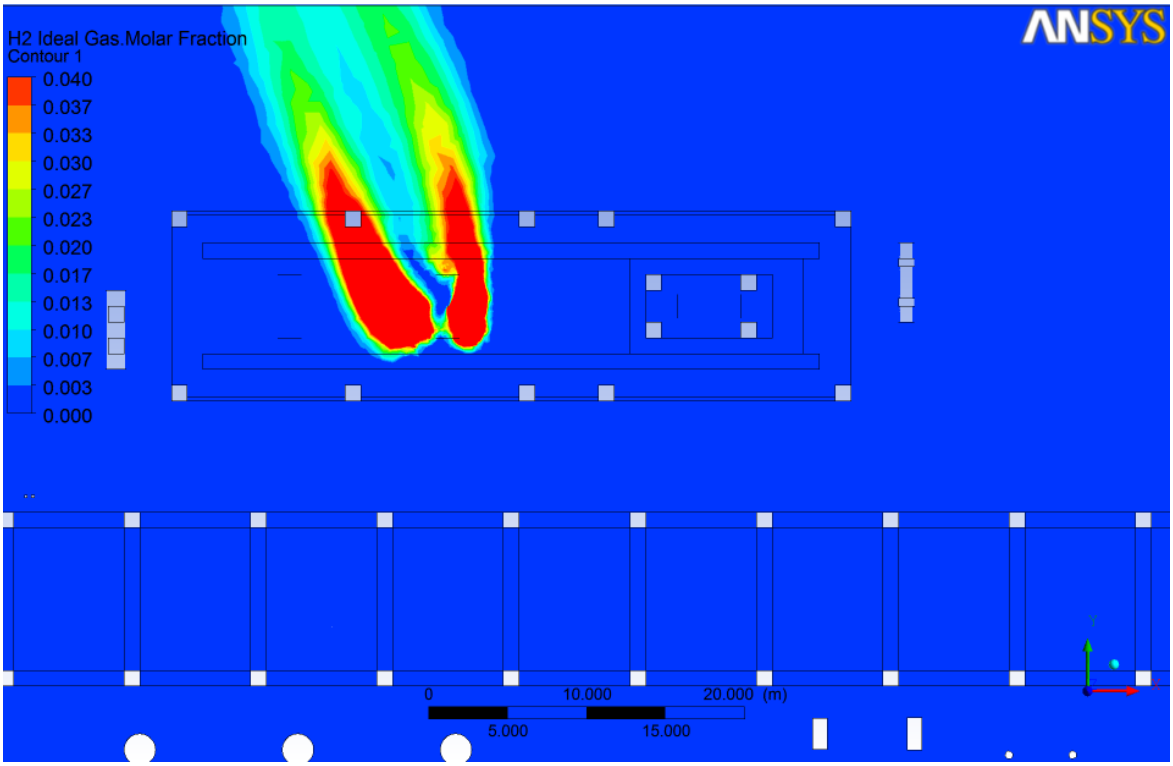
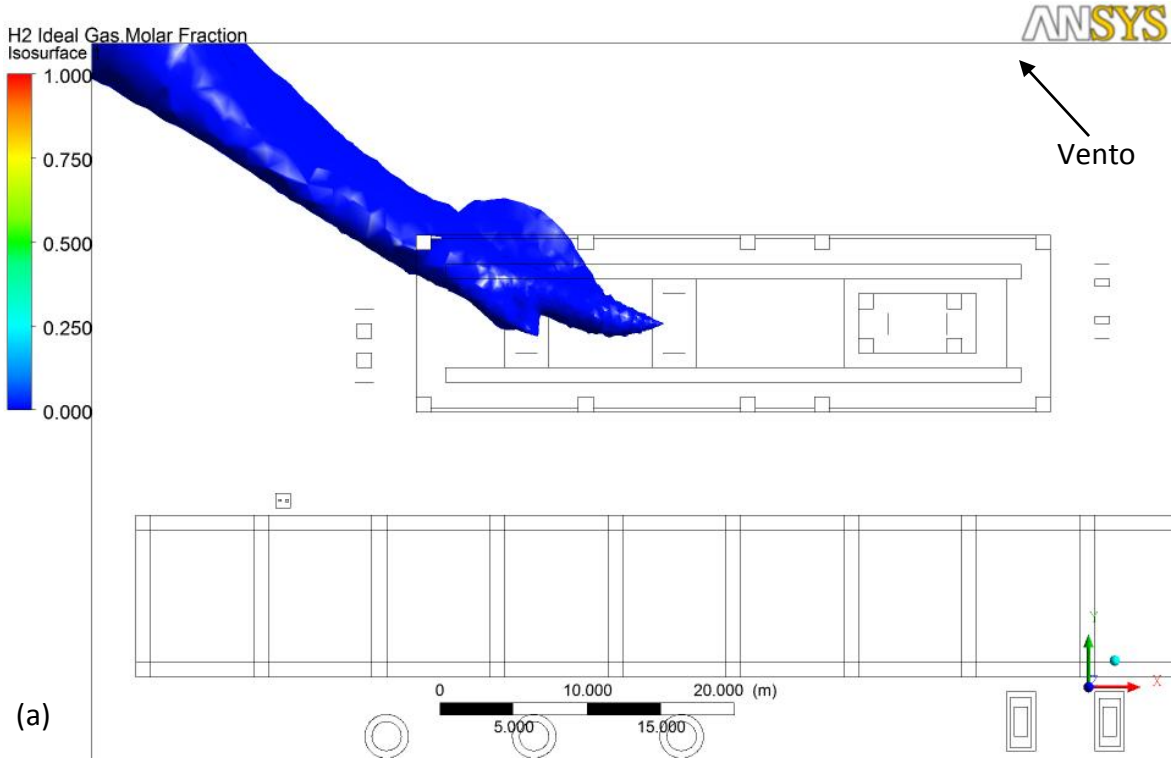


Figura 113: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento sudeste (cenário 27).



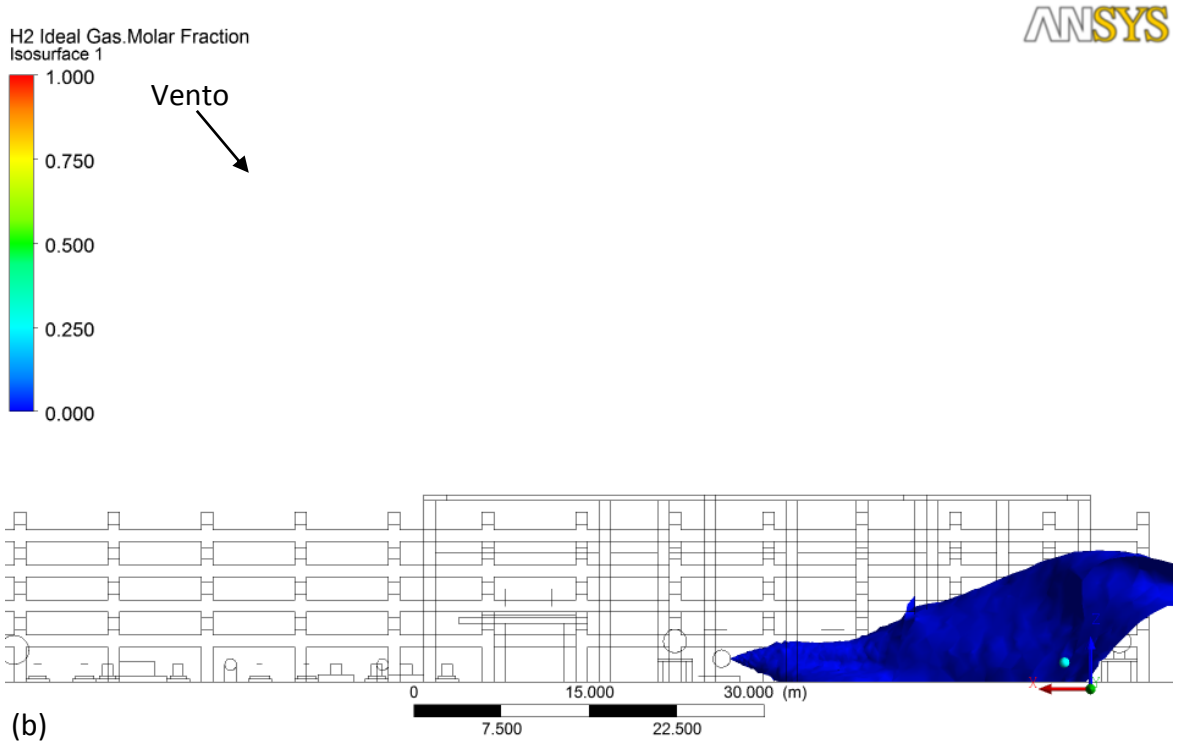


Figura 114: Cenário 28: Vento sudeste, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

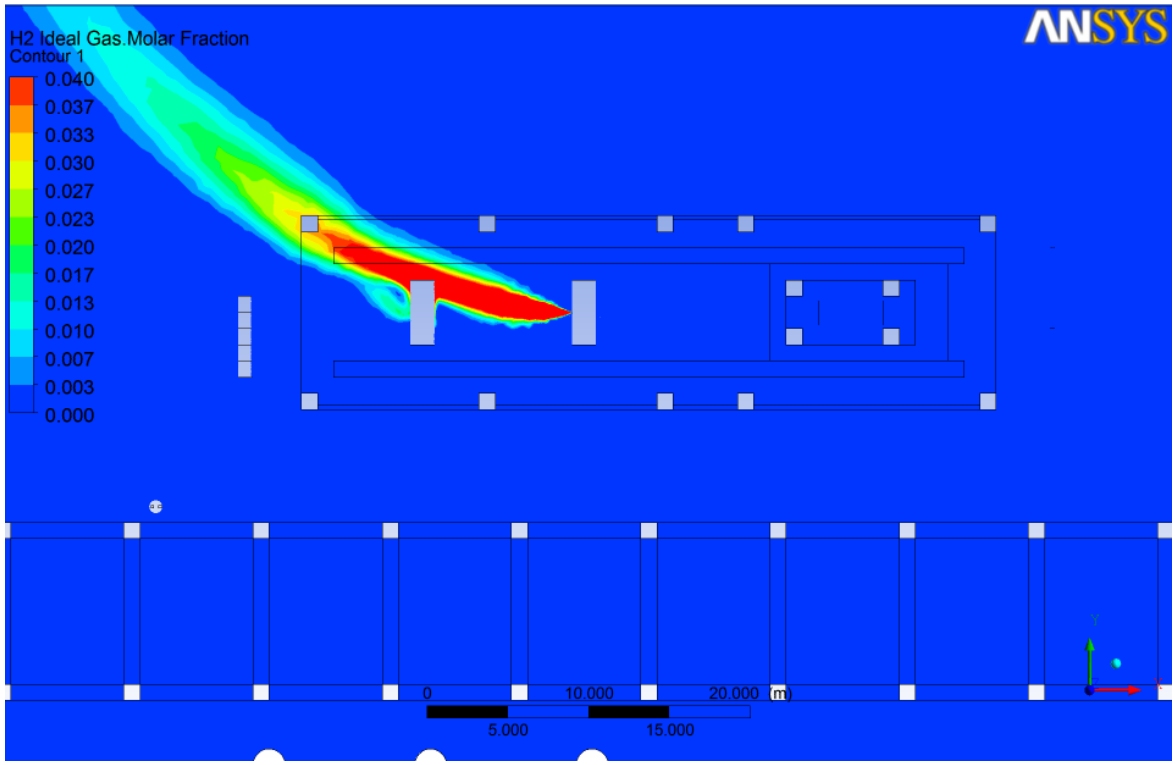


Figura 115: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento sudeste (cenário 28).

Vento Sudoeste

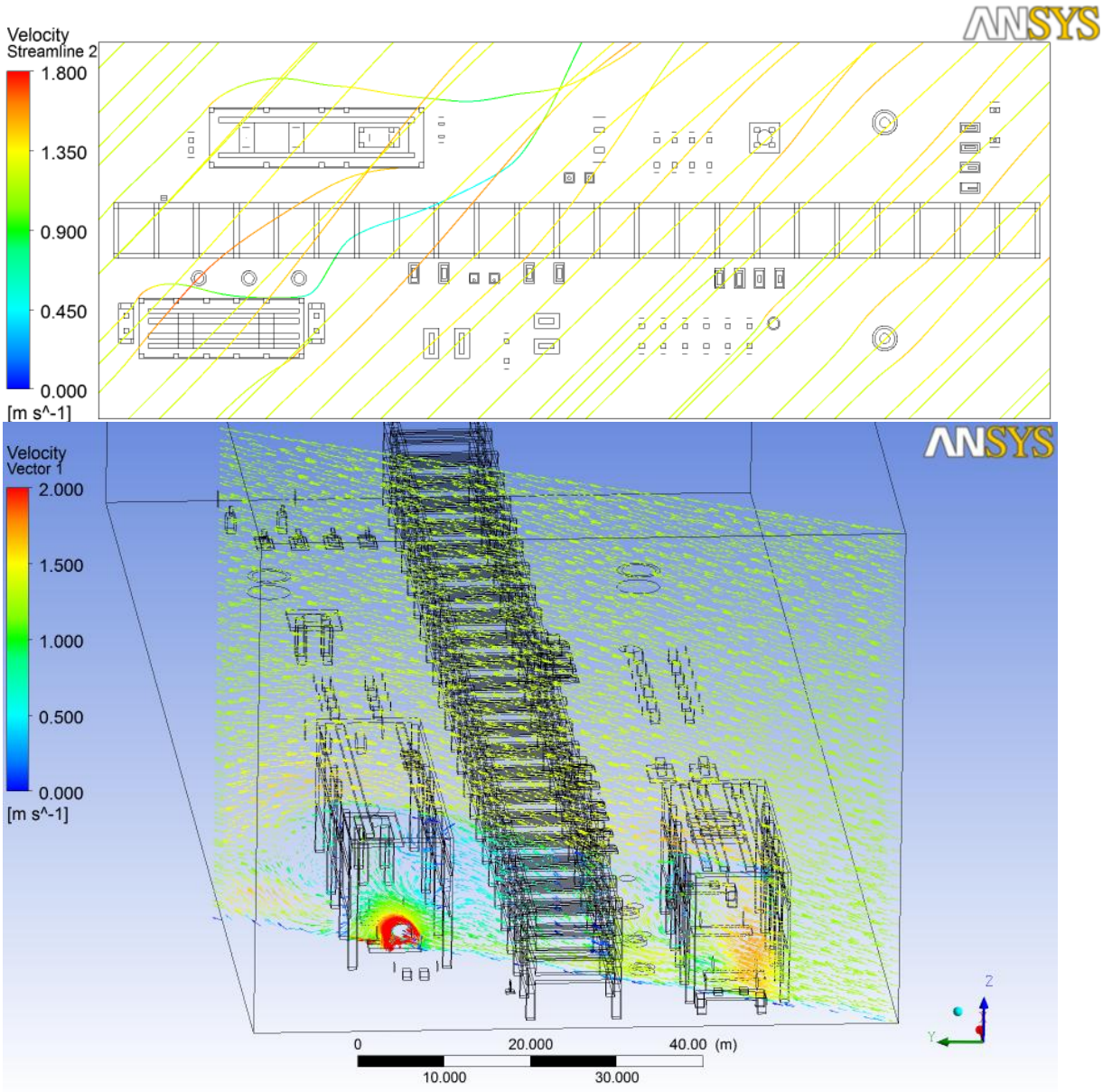


Figura 116: Campo de escoamento do vento na direção sudoeste nas formas de: (a) linhas de corrente (vista superior); (b) vetores velocidade (plano diagonal).

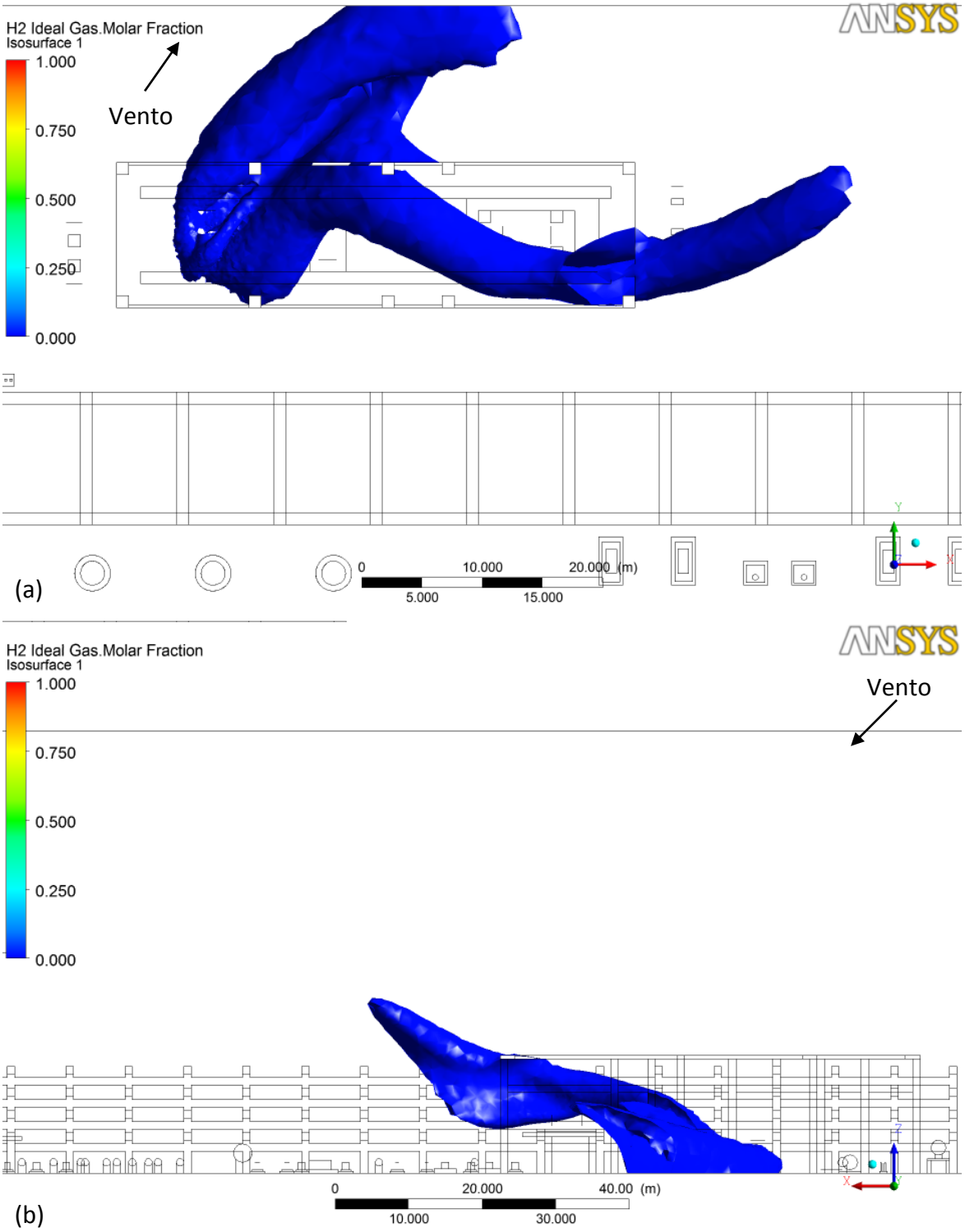


Figura 117: Cenário 29: Vento sudoeste, compressor C-02A, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

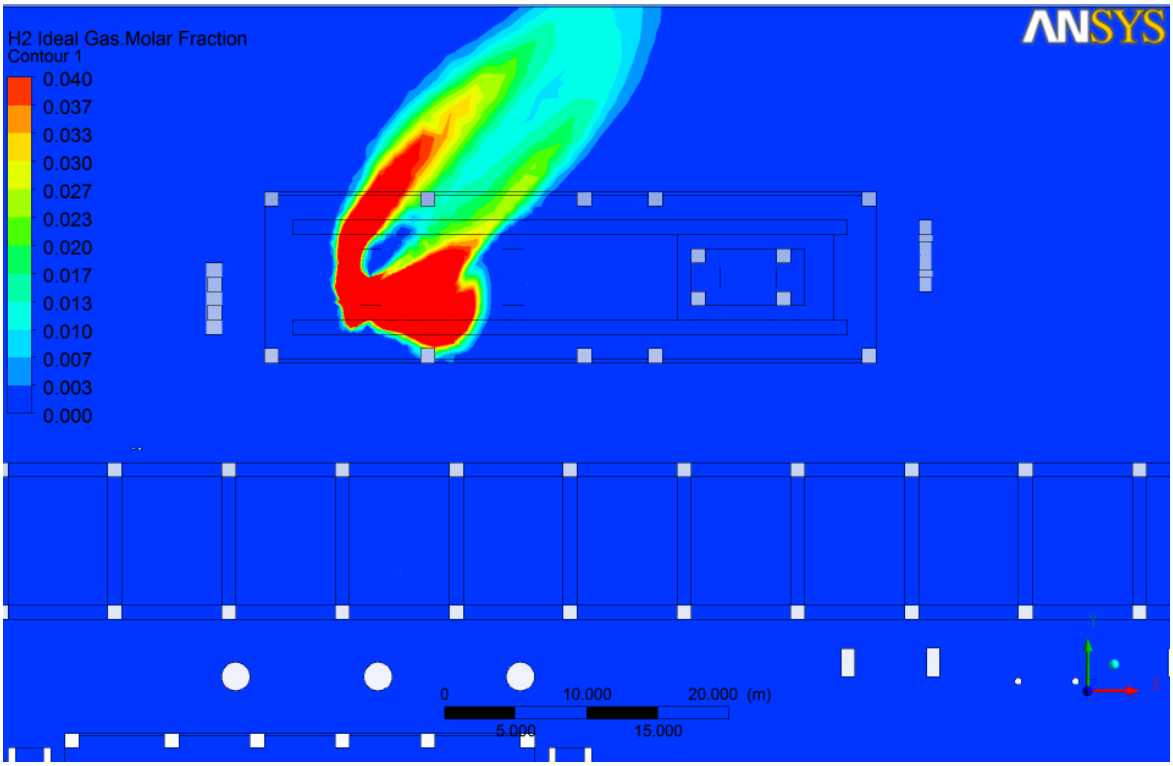
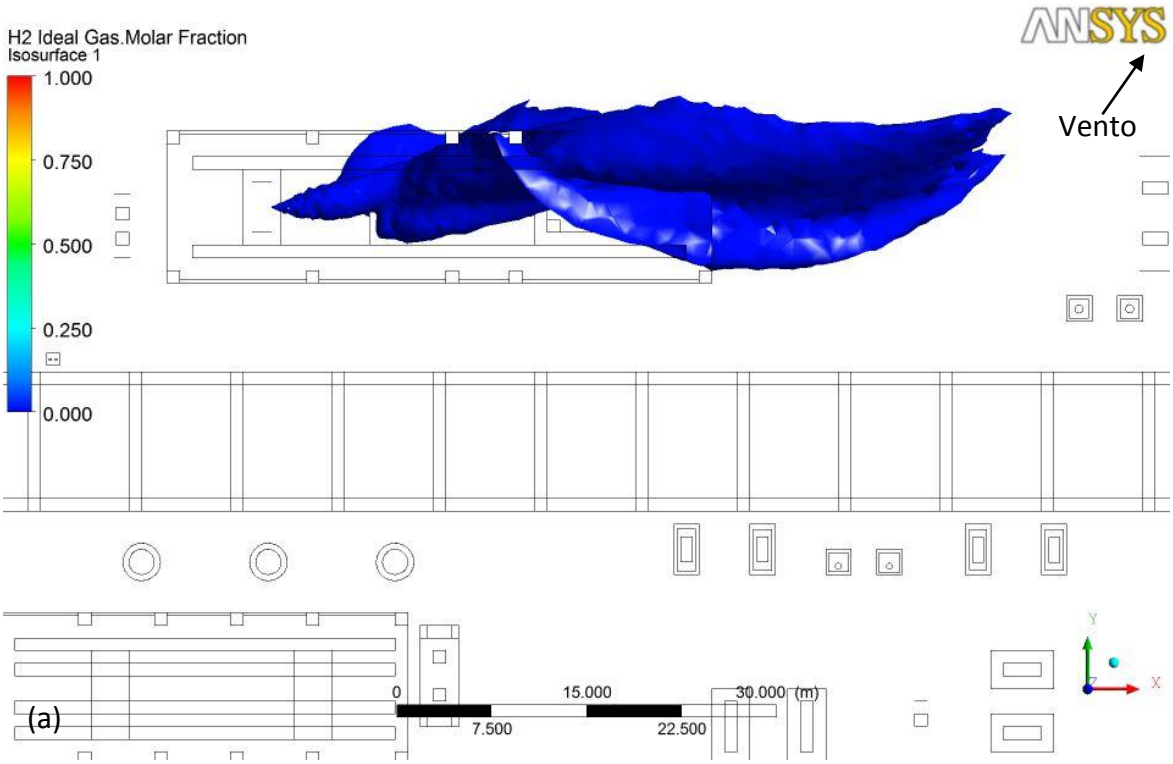


Figura 118: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para baixo e vento sudoeste (cenário 29).



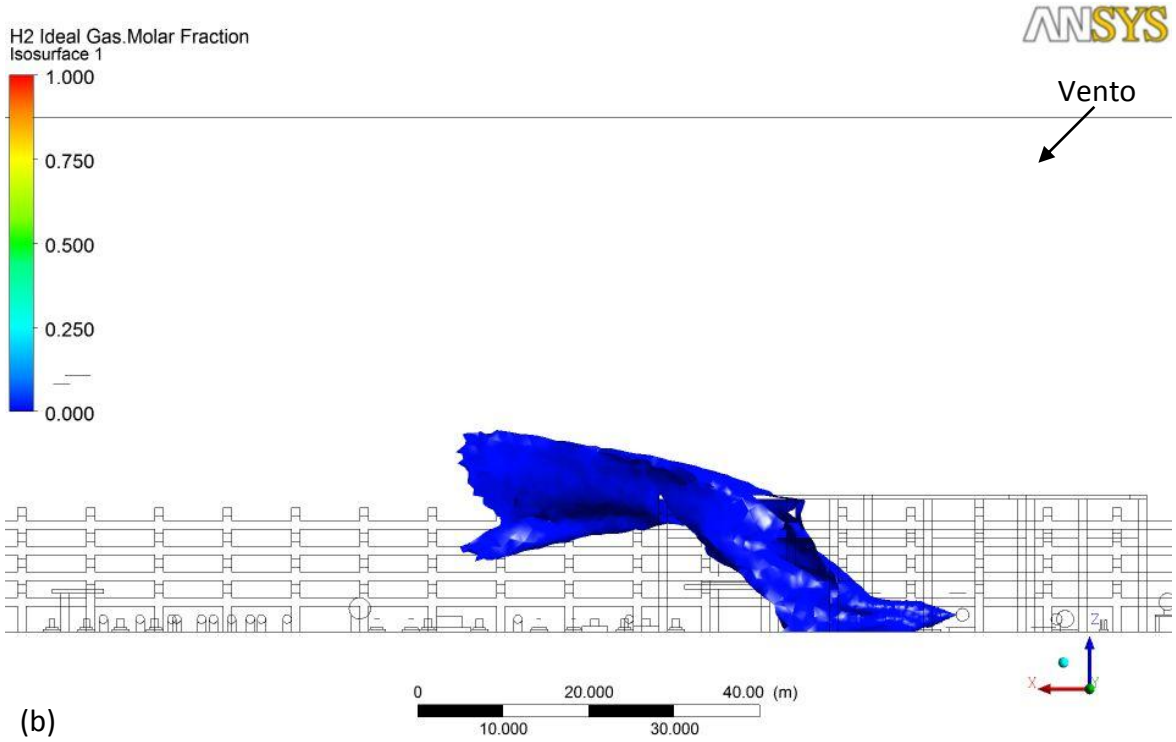


Figura 119: Cenário 30: Vento sudeste, compressor C-02A, direção de vazamento para leste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

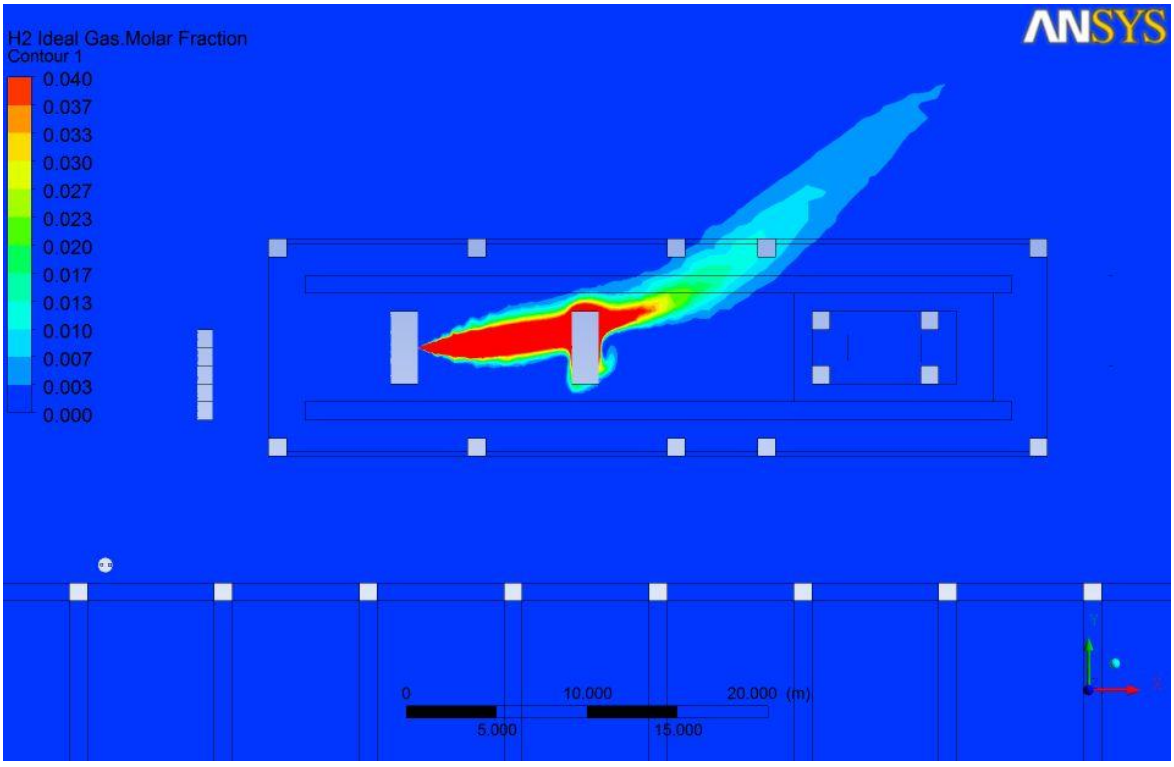


Figura 120: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02A, com direção para leste e vento sudoeste (cenário 30).

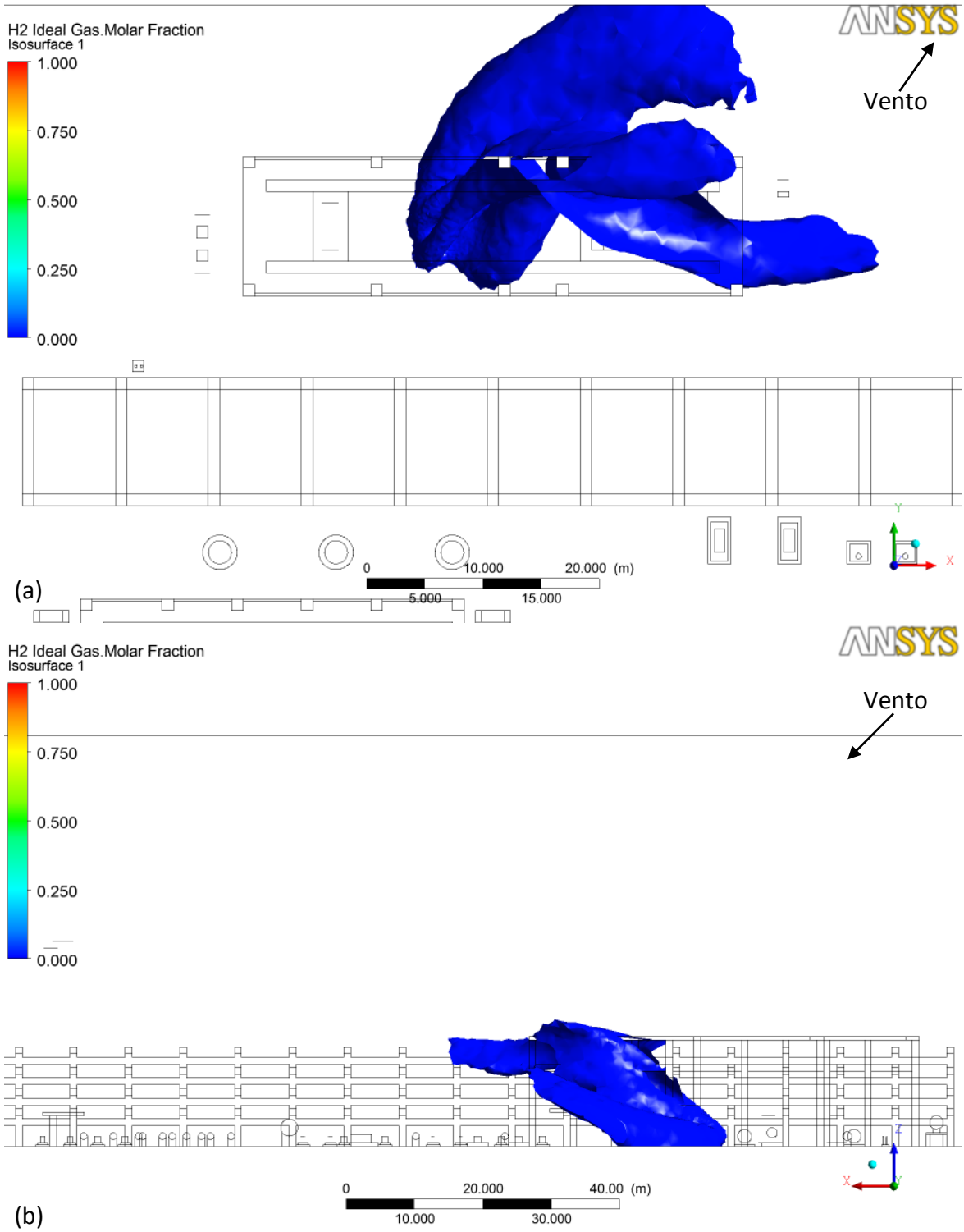


Figura 121: Cenário 31: Vento sudoeste, compressor C-02B, direção de vazamento para baixo. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

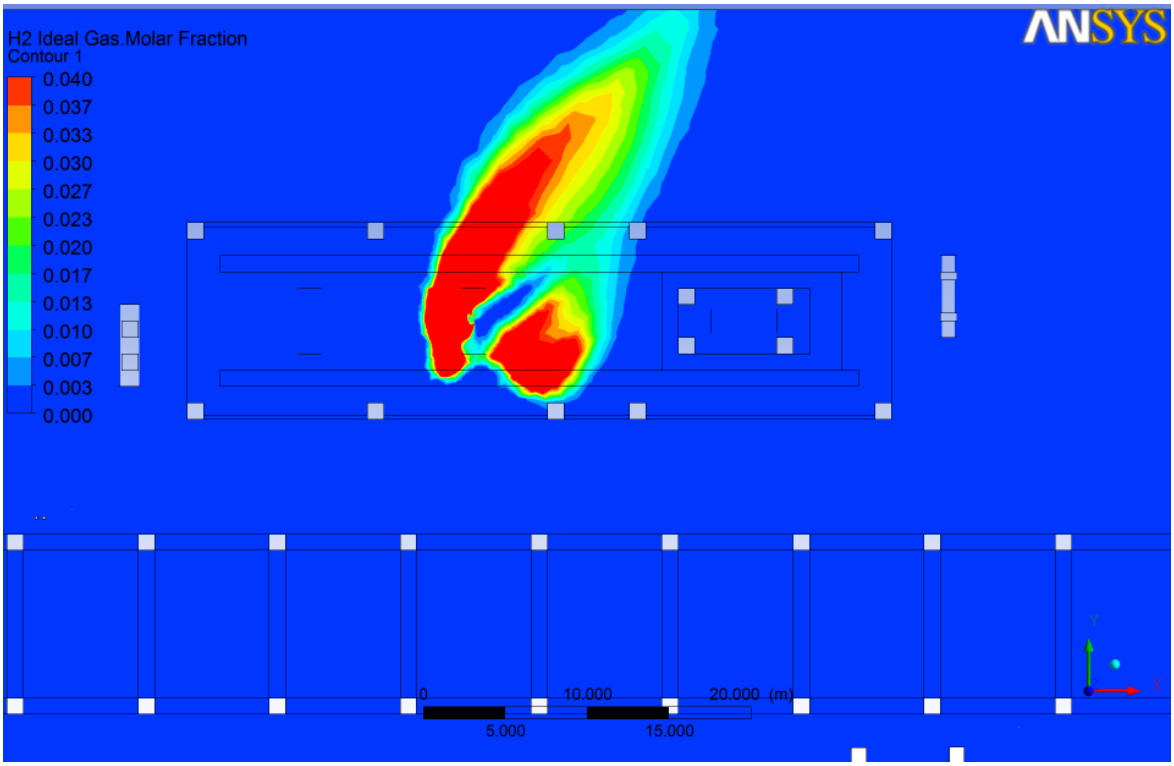
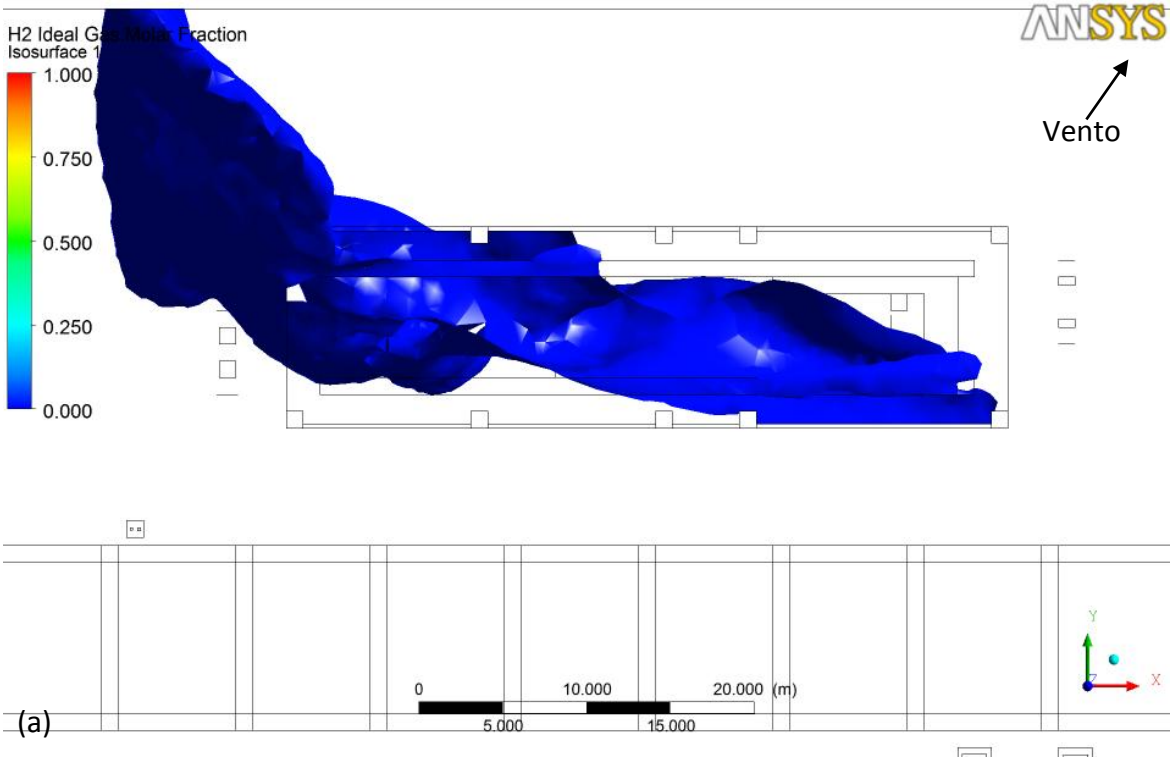


Figura 122: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para baixo e vento sudoeste (cenário 31).



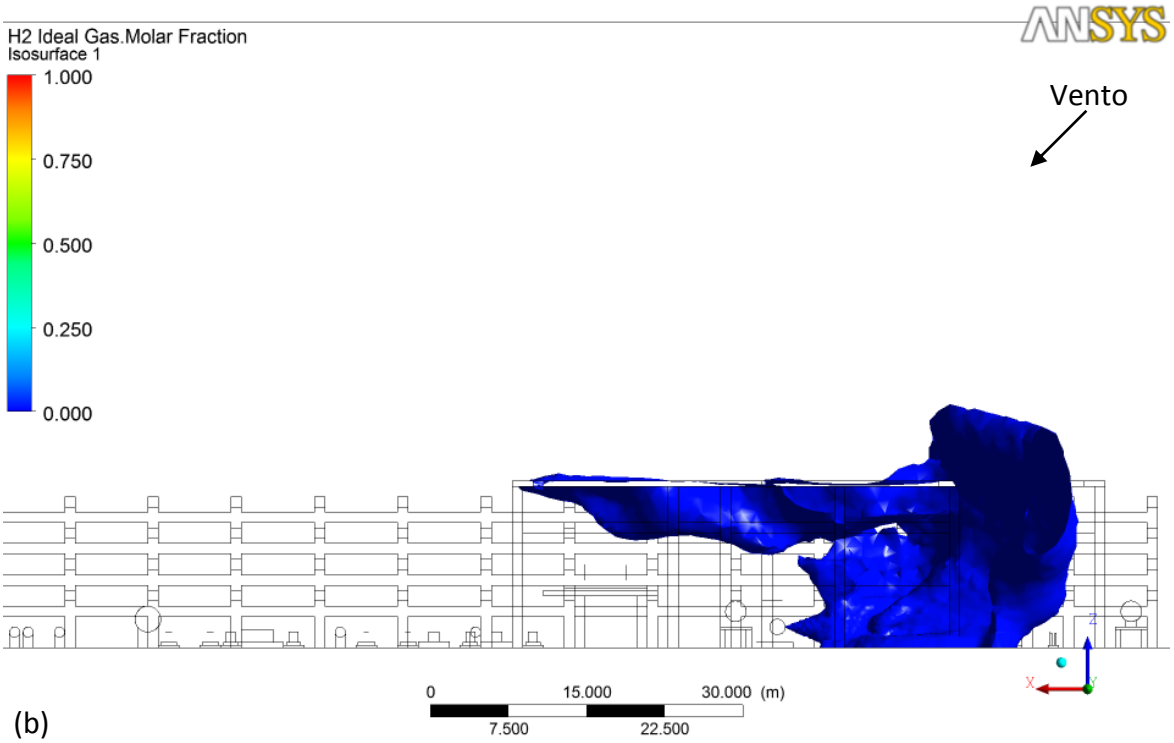


Figura 123: Cenário 32: Vento sudoeste, compressor C-02B, direção de vazamento para oeste. Nuvem de 20% do LII: (a) Vista superior; (b) Vista em corte.

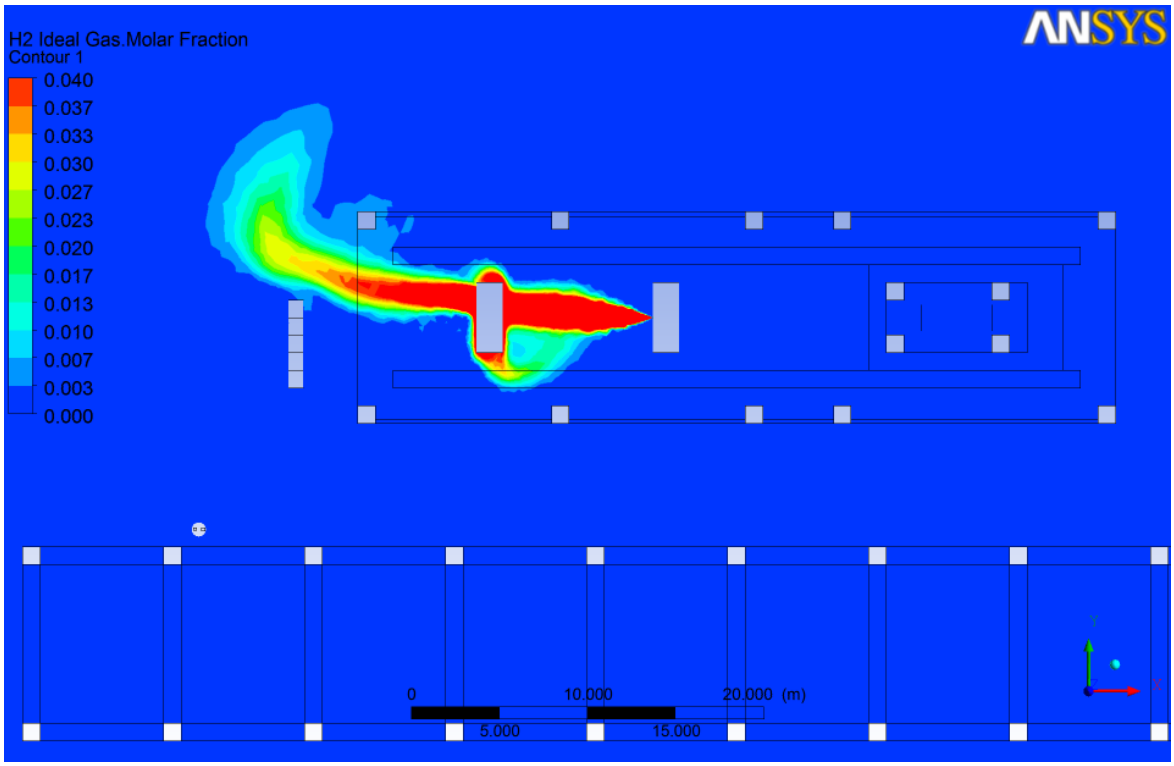


Figura 124: Contorno em Z da nuvem entre 0% e 100% do LII, proveniente de vazamento no compressor C-02B, com direção para oeste e vento sudoeste (cenário 32).