

Bruno Góbi Santolin

**LIBERAÇÃO ACIDENTAL EM LINHA DE GÁS  
PRESSURIZADA: SIMULAÇÃO DE CENÁRIOS  
E GERAÇÃO DE DADOS PARA MODELOS DE  
GESTÃO DE RISCO**

Vitória, ES

2022



PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA  
CENTRO TECNOLÓGICO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

# LIBERAÇÃO ACIDENTAL EM LINHA DE GÁS PRESSURIZADA: SIMULAÇÃO DE CENÁRIOS E GERAÇÃO DE DADOS PARA MODELOS DE GESTÃO DE RISCO

**BRUNO GÓBI SANTOLIN**

COMISSÃO EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Márcio Ferreira Martins  
Orientador PPGEM/UFES

*Daniel Cruz*

---

Prof. Dr. Daniel Onofre de Almeida Cruz  
Examinador Externo – COPPE/UFRJ

---

Prof. Dr. Ramon Silva Martins  
Examinador Externo – DEM/UFES

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Espírito Santo como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica

Vitória (ES), 15 de setembro de 2022.



# Agradecimentos

Gostaria de agradecer a meus pais, por me incentivarem a seguir os estudos.

À minha irmã por me desafiar a cada passo e a sempre repensar minhas convicções.

Aos meus amigos pelo apoio.

À minha namorada por não me deixar desistir, mesmo quando era só isso que queria.

Ao meu orientador por me mostrar o caminho certo para conseguir alcançar os objetivos propostos.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - CAPES - pelo apoio financeiro prestado.

# Resumo

Três modelos numéricos foram propostos para representar os principais fenômenos decorrentes do vazamento de gases pressurizados em dutos utilizando o *software Ansys Fluent*. Cada um dos modelos apresentados foram validados de maneira qualitativa e quantitativa. Os resultados obtidos foram satisfatórios pois a faixa de erro médio máximo obtida em relação aos parâmetros experimentais ficaram entre 4,97% e 8,88%. Durante as validações, foi observado que para o fenômeno de despressurização há uma rápida queda de pressão durante o tempo, mais que tende a se estabilizar em um valor de aproximadamente 5 MPa que persistiu nos sensores mais próximos a saída da tubulação. Para a expansão foram obtidas as principais sub-regiões deste fenômeno, bem como a validação da posição onde ocorre a mudança abrupta de velocidade, que é necessária para o levantamento dos dados de entrada para o fenômeno de dispersão. Por fim o fenômeno de dispersão teve como princípio a validação do campo de concentração do gás poluente (Freon 12) em um domínio onde um obstáculo estava a 50 m da fonte de vazamento. O modelo representou bem o comportamento da concentração molar de Freon 12 nas faces de barlavento e sotavento do obstáculo, mostrando que a presença dele aumenta a dispersão lateral do gás e o aprisiona por mais tempo na face de sotavento, dessa forma o modelo permite avaliar qual a distância máxima que a nuvem do gás poluente poderá alcançar apontando os pontos críticos do domínio de estudo em relação a concentração perigosa do gás poluente. Como contribuições, o uso da ferramenta *patch* presente no *Fluent* permitiu a divisão das condições da tubulação e do ambiente, aplicação nos elementos da malha suas respectivas condições iniciais, representando melhor a física do problema, além disso, uma malha adaptativa foi utilizada, refinando nas regiões onde os gradientes de velocidade e pressão eram mais relevantes, além da aplicação de uma UDF (*User Defined function*) para contabilizar os efeitos do empuxo causados pela mudança de massa específica provocada pela equação de gás real de *Peng-Robinson*. Os modelos apresentados servem como uma ótima ferramenta para o auxílio de empresas e indústrias que trabalham com gasodutos a conhecerem esse tipo de vazamento e trazer as consequências a níveis aceitáveis com base em um domínio de estudo.

**Palavras-chaves:** Gasodutos, fenômenos de vazamento, gases pressurizados, *Ansys Fluent*.

# Abstract

*Three numerical models were proposed to represent the main phenomena resulting from the leakage of pressurized gases in pipe using the Ansys Fluent software. Each of the presented models were validated qualitatively and quantitatively. The results obtained were satisfactory because the maximum average error range obtained in relation to the experimental parameters was between 4,97% and 8,88%. During the validations, it was observed that for the depressurization phenomenon there is a fast pressure drop over time, but it tends to stabilize at a value of approximately 5 MPa that persisted in the sensors closest pipe outlet. For the expansion, the main sub-regions of this phenomenon were obtained, as well as the validation of the position where the abrupt change in velocity occurs, which is necessary for the collection of input data for the dispersion phenomenon. Finally, the dispersion phenomenon had as its principle the validation of the pollutant gas (Freon 12) concentration field in a domain where an obstacle was 50 m from the leak source. The model well represented the behavior of the molar concentration of Freon 12 on the windward and leeward faces of the obstacle, showing that its presence increases the lateral dispersion of the gas and traps it for a longer time on the leeward face, the maximum distance that the pollutant gas cloud can reach, pointing out the critical points of the study domain in relation to the dangerous concentration of the polluting gas. How contributions, the use of the patch tool present in Fluent allowed the division of the pipe and environment conditions, application in the mesh elements their respective initial conditions, better representing the physics of the problem, in addition, an adaptive mesh was used, refining the regions where the velocity and pressure gradients were more relevant, moreover the application of UDF (User Defined function) for buoyancy effects caused by density changes in the real gas equation of Peng-Robinson. The presented models as a great tool to help companies and industries that work with pipelines to know this type of leak and bring the consequences to acceptable levels based on a domain of study.*

**Key- Words:** *Pipelines, leakage phenomena, pressurized gases, Ansys Fluent.*

# Lista de ilustrações

Figura 1 – Esquema dos fenômenos de vazamento em gasodutos. . . . .	14
Figura 2 – Disco de ruptura antes e depois da ruptura. . . . .	16
Figura 3 – Detalhes da formação do disco de <i>Mach</i> no fenômeno de expansão. . .	18
Figura 4 – Escopo do experimento realizado por Botros et al. (2004). . . . .	23
Figura 5 – Trecho final da geometria destacando os sensores de pressão e a saída da tubulação para a atmosfera. . . . .	24
Figura 6 – (a) Detalhamento da Malha na tubulação e na (b) Atmosfera . . . . .	24
Figura 7 – Evolução da pressão no sensor P1, valores numéricos x valores experimentais. . . . .	30
Figura 8 – Evolução da pressão no sensor P8, valores numéricos x valores experimentais. . . . .	31
Figura 9 – Contorno de velocidade logo após a saída da tubulação. . . . .	31
Figura 10 – Contorno de temperatura logo após a saída da tubulação. . . . .	32
Figura 11 – Geometria e malha para o modelo de expansão . . . . .	34
Figura 12 – Malha adaptativa para o modelo de expansão . . . . .	35
Figura 13 – Perfil de velocidade após a saída da tubulação. . . . .	37
Figura 14 – Contorno de velocidade para o modelo de expansão. . . . .	37
Figura 15 – Perfil de velocidade 0,2 mm a montante do disco de <i>Mach</i> . . . . .	39
Figura 16 – Perfil de velocidade 0,2 mm a jusante do disco de <i>Mach</i> . . . . .	39
Figura 17 – Contorno de pressão para o fenômeno de expansão. . . . .	40
Figura 18 – Contorno de temperatura para o fenômeno de expansão. . . . .	40
Figura 19 – Vista do obstáculo cúbico a jusante da fonte cilíndrica. . . . .	41
Figura 20 – Esquema do domínio computacional para o modelo de dispersão. . . . .	43
Figura 21 – (a) Detalhamento da Malha próxima a fonte e obstáculo 3D e (b) 2D . .	43
Figura 22 – Padrão de fluxo de estado estacionário no plano médio (Velocidade). .	48
Figura 23 – Evolução da concentração molar de Freon 12 a 6,4 m de elevação no lado de barlavento do obstáculo - simulação vs numérico. . . . .	49
Figura 24 – Evolução da concentração molar de Freon 12 a 0,4 m no lado de sotavento do obstáculo - simulação vs numérico. . . . .	49
Figura 25 – Evolução da fração molar de Freon 12 durante o tempo. . . . .	51
Figura 26 – Divisão da geometria para aplicação da ferramenta <i>patch</i> . . . . .	61
Figura 27 – Passos para aplicação da ferramenta <i>patch</i> . . . . .	62
Figura 28 – Passos para compilação da UDF no <i>Fluent</i> 1/2. . . . .	65
Figura 29 – Passos para compilação da UDF no <i>Fluent</i> 2/2. . . . .	65
Figura 30 – Teste de malha para o fenômeno de expansão. . . . .	66
Figura 31 – Passos para implementação da malha adaptativa. . . . .	67

Figura 32 – Teste de malha para o fenômeno de expansão com malha adaptativa. . 67

# Lista de tabelas

Tabela 1 – Composição para o gás natural utilizado no experimento (BOTROS et al., 2004). . . . .	22
Tabela 2 – Métodos de solução para o modelo de despressurização. . . . .	30
Tabela 3 – Métodos de solução para o modelo de expansão. . . . .	36
Tabela 4 – Erro relativo para a posição do disco de <i>Mach</i> . . . . .	38
Tabela 5 – Métodos de solução para o modelo de dispersão. . . . .	48



# Lista de abreviaturas e siglas

NBR	Norma Brasileira
ISO	<i>International Organization of Standardization</i> (Organização Internacional de Normalização)
IEC	<i>International Electrotechnical Commission</i> (Comissão Eletrotécnica Internacional)
ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i> (Dinâmica de Fluidos Computacional)
GLP	Gás liquefeito de Petróleo
HEM	<i>Homogeneous Equilibrium Model</i> (Modelo de Equilíbrio Homogêneo)
HRM	<i>Homogeneous Relaxation Model</i> (Modelo de Relaxação Homogêneo)
UDF	<i>User defined function</i> (função definida pelo usuário)
MG	Média geométrica
VG	Variância geométrica
SST	<i>Shear Stress Transport</i> (Transporte de Tensão Cisalhante)

# Lista de Símbolos

## Nomenclatura

$X_{Mach}$	Posição onde ocorre a transição de $Mach \gg 1$ para $Mach \leq 1$ [m]
$d$	Diâmetro [m]
$p$	Pressão [Pa]
$V$	Volume [m <sup>3</sup> ]
$n$	Número de moles de gás [mol]
$R$	Constante universal dos gases [J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]
$T$	Temperatura [K]
$k$	Energia cinética turbulenta [m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup> ]
$v$	Velocidade [m s <sup>-1</sup> ]
$S$	termo fonte da massa transferida da fase contínua para dispersa [kg m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup> ]
$F$	Forças de corpo [kg m <sup>-2</sup> s <sup>-2</sup> ]
$S_{rad}$	Termo fonte de calor por radiação [m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
$k_{eff}$	condutividade térmica efetiva [W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]
$E$	Energia de ativação [J kg <sup>-1</sup> ]
$h$	Entalpia [J kg <sup>-1</sup> ]
$Y$	Fração molar das espécies
$J$	Fluxo de difusão das espécies [m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
$g$	Gravidade [m s <sup>-2</sup> ]
$T_c$	Temperatura no ponto crítico [K]
$P_c$	Pressão no ponto crítico [Pa]
$C_{obs}$	Valor obtido de determinada variável nas simulações numéricas
$C_{exp}$	Valor obtido de determinada variável no experimento a ser comparado
$t$	Tempo [s]

$D_h$  Diâmetro hidráulico [m]

$A$  Área [m<sup>2</sup>]

$P$  Perímetro [m]

### Letras gregas

$\varepsilon$  Dissipação de energia cinética turbulenta [m<sup>2</sup> s<sup>-3</sup>]

$\rho$  Densidade [kg m<sup>-3</sup>]

$\mu$  Viscosidade dinâmica [Pa s]

$\nabla$  Operador nabla, utilizado para cálculo de divergente e gradiente de vetores

$\xi$  Fator acêntrico

$\omega$  Taxa de dissipação turbulenta específica [s<sup>-1</sup>]

$\Gamma$  Difusividade efetiva para o modelo de turbulência k  $\omega$  [Pa s]

### Subescritos

*lib* Liberação

*amb* Ambiente

*x* Direção axial (utilizada nos equacionamentos bidimensional com eixo de simetria axial)

*r* Direção radial (utilizada nos equacionamentos bidimensional com eixo de simetria axial)

*i* Índice que representa a posição dos eixos  $x, y, z$  nos equacionamentos tridimensionais

*t* Turbulência

*ent* Região de entrada de vento para o modelo numérico proposto para dispersão

# Sumário

	Lista de Símbolos . . . . .	9
1	<b>INTRODUÇÃO . . . . .</b>	<b>13</b>
2	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA . . . . .</b>	<b>16</b>
2.1	Despressurização em tubulações pressurizadas . . . . .	16
2.2	Expansão à pressão atmosférica . . . . .	17
2.3	Dispersão do gás na atmosfera . . . . .	19
2.4	Estado da Arte . . . . .	20
3	<b>MODELAGEM DO FENÔMENO DE DESPRESSURIZAÇÃO . . . . .</b>	<b>22</b>
3.1	Geometria e Malha . . . . .	23
3.2	Equacionamento . . . . .	25
3.3	Modelo estatístico . . . . .	28
3.4	Métodos de solução . . . . .	29
3.5	Resultados . . . . .	29
4	<b>MODELAGEM DO FENÔMENO DE EXPANSÃO . . . . .</b>	<b>33</b>
4.1	Geometria e malha . . . . .	34
4.2	Equacionamento . . . . .	35
4.3	Métodos de solução . . . . .	36
4.4	Resultados . . . . .	36
5	<b>MODELAGEM DO FENÔMENO DE DISPERSÃO . . . . .</b>	<b>41</b>
5.1	Geometria e malha . . . . .	42
5.2	Equacionamento . . . . .	44
5.3	Métodos de Solução . . . . .	47
5.4	Resultados . . . . .	47
6	<b>CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS . . . . .</b>	<b>52</b>
	<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>54</b>
	<b>ANEXOS . . . . .</b>	<b>60</b>
	<b>ANEXO A – FERRAMENTA <i>PATCH</i> . . . . .</b>	<b>61</b>

<b>ANEXO B – UDF . . . . .</b>	<b>63</b>
<b>ANEXO C – MALHA ADAPTATIVA . . . . .</b>	<b>66</b>

# 1 Introdução

A atenção crescente à segurança nas indústrias influenciou o processo de avaliação de risco, enfatizando a importância de modelar as consequências de possíveis acidentes e seus cenários resultantes, esse processo é fundamental, pois existem regulamentações, leis rígidas, além de normas, como por exemplo, a NBR ISO/IEC 31010 2012, nela destaca-se em um dos seus tópicos a necessidade de ter o conhecimento de determinado acidente, para trazer a níveis aceitáveis suas possíveis consequências (([ABNT](#)), 2009).

Para prever as possíveis consequências de determinado acidente é necessária uma avaliação experimental ou numérica dos fenômenos associados a ele. As indústrias que trabalham com vasos pressurizados, realizam o transporte desses fluidos através de gasodutos e embora sejam relativamente seguros, estão sujeitos a algumas falhas causadas por corrosão, erros de manutenção, impactos externos e erros do operador provocando à liberação acidental de gases proveniente de uma ruptura (parcial ou total) ou furo nos dutos ([KOORNNEEF et al., 2010](#); [TENG et al., 2016](#)).

O problema do vazamento acidental, além do fechamento de plantas e interrupções dos processos de produção, é a exposição de humanos e do meio ambiente a gases tóxicos e contaminantes. Por exemplo, o dióxido de carbono ( $CO_2$ ), como um asfixiante e um gás pesado, uma vez vazado se acumulava em áreas baixas trazendo grande risco a vida ([LI et al., 2016](#)). Um exemplo clássico aconteceu em 1986, quando uma abundante quantidade de  $CO_2$  liberada do Lago Nyos em Camarões matou 1.700 pessoas e vários animais domésticos ([KLING et al., 1987](#)). Da mesma forma que o vazamento de outros gases mais conhecidos trazem prejuízos, os mais diversos, tais como o vazamento de amônia em frigoríficos ([PURNAMA; SYAFRUDIN; HUBOYO, 2020](#)), ou gás combustível metano ( $CH_4$ ) que tem alto risco de explosão ([SHINDELL et al., 2012](#)).

Vista a importância do estudo de vazamentos de gases pressurizados, é importante destacar como ele acontece enfatizando os principais fenômenos físicos como pode ser representado pela [Figura 1](#). O vazamento de gases a altas pressões se inicia com a depressurização no duto por meio de um orifício ou do rompimento total dele, ocorrendo assim uma onda de descompressão de forma que toda energia de pressão e temperatura acumulada será transformada em energia cinética (pela conservação da quantidade de movimento e energia) aumentando assim a velocidade do escoamento ([MOLAG; DAM, 2011](#)). A onda de descompressão dará início a uma rápida expansão da pressão de estagnação até a pressão ambiente, o escoamento da parte da expansão é geralmente estrangulado e alcança velocidades sônicas, ou seja, com quantidade de movimento muito alto. Essa categoria de escoamento ocorre quando a razão entre a pressão de liberação e a pressão

ambiente é maior que o valor crítico (INSTITUTE, E., 2010). Quando a razão é maior que cinco, ocorre formação de um jato sub-expandido e do disco de *Mach* depois do orifício (ORESCANIN; AUSTIN, 2010). Após a expansão, o jato sub expandido com quantidade de movimento muito alto tende a se dispersar pelo ambiente, após viajar por certa distância essa “nuvem” perderá seu impulso até que sua concentração seja desprezível (WITLOX et al., 2014).

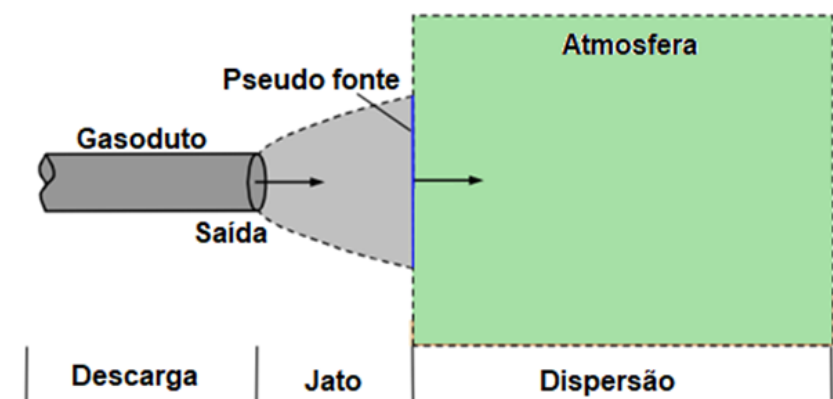


Figura 1 – Esquema dos fenômenos de vazamento em gasodutos.

Fonte: Adaptado de Deng et al. (2018).

Para avaliar os riscos representados por liberações de gasodutos, é necessário modelos de consequências adequados que sejam validados experimentalmente. A modelagem dos fenômenos associados devem fornecer um cenário de referência para simulação adequada da depressurização, expansão e dispersão do gás pressurizado, estimando assim o impacto desse vazamento no ambiente circundante na sequência de uma liberação acidental (LANKADASU et al., 2015).

Para o fenômeno de depressurização é necessário a obtenção dos parâmetros de escoamento na saída da tubulação, como pressão, temperatura, massa específica, velocidade e a taxa de fluxo de massa. Esses dados também podem ser tratados como entradas para prever a subsequente expansão e dispersão atmosférica. A parte de expansão determina as condições de fluxo do jato, os dados obtidos quando a pressão ambiente é alcançada podem ser usados como valores de entrada para a parte de dispersão. Na parte de dispersão, o fluido pode ser tratado como incompressível. A influência de diferentes condições de operação e ambiente, como geografia (presença de obstáculos), condições do ambiente (pressão, temperatura, velocidade do vento), pressão e temperatura inicial do gasoduto, afetam diretamente na dispersão do gás poluente e precisam de certa atenção durante a modelagem (LIU et al., 2016).

Perante o contexto descrito acima, os objetivos são:

- Geral

- Simular cenários de vazamento em linha de gases pressurizada gerando um setup numérico necessário para modelos de gestão de riscos.
- Específicos
  - Definir os experimentos para cada fenômeno do vazamento, modelando computacionalmente cada um deles.
  - Validação dos modelos numéricos de maneira qualitativa e quantitativa.
  - Indicar as contribuições obtidas com base nos modelos validados para a literatura abordada.

As seções a seguir foram estipuladas com o intuito de alcançar os objetivos apresentados, primeiro uma revisão bibliográfica é apresentada no [Capítulo 2](#) com o foco em cada um dos fenômenos, ou seja, o entendimento do comportamento de despressurização de gasodutos, expansão e dispersão foi apresentado, além das considerações, experimentos e avanços obtidos nessa área de estudo também foram incluídos nesta seção. Os capítulos [3](#), [4](#) e [5](#) mostram toda a modelagem numérica dos fenômenos de vazamento para requisitos de validação qualitativa e quantitativa, destacando os métodos suplementares utilizados, como a utilização da ferramenta *patch* presente no *Fluent* permitindo a aplicação nos elementos da malha as condições de estagnação da tubulação assim como as condições do ambiente respeitando a fronteira entre esses elementos, aplicação da malha adaptativa para capturar os gradientes de velocidade e pressão que são abruptos logo após a saída da tubulação, que melhorou significativamente os resultados se comparados a um refino total da malha, além disso, foi utilizada a equação de gás real de *Peng-Robinson* para mudanças de massa específica devido aos efeitos de compressibilidade serem relevantes, em decorrência dessa mudança da massa específica os efeitos do empuxo são significativos e por isso uma UDF (*User Defined function*) foi realizada para contabilizar esses efeitos, dessa forma esses passos realizados são de extrema importância, pois servem de contribuição para o levantamento bibliográfico apresentado. Os modelos validados serão uma ótima ferramenta para o auxílio de empresas e indústrias que trabalham com gasodutos a conhecerem quais as principais consequências decorrentes deste tipo de vazamento e posteriormente criarem uma base de dados por meio de um caso de aplicação, formulando assim com mais precisão planos de contingência para este tipo de acidente. Finalmente, as conclusões e as perspectivas futuras são apresentadas no [Capítulo 6](#) com base em tudo que foi apresentado.



## 2 Revisão Bibliográfica

Os trabalhos publicados relevantes na área de estudo dos fenômenos de despressurização, expansão e dispersão atmosférica foram revisados, destacando-se os avanços, experimentos e considerações para posterior modelagem numérica de cada um deles, ressaltando ao final a contribuição da presente dissertação na literatura.

### 2.1 Despressurização em tubulações pressurizadas

Os primeiros estudos focados no comportamento do fenômeno de despressurização tiveram como base testes em escala real, alguns desses testes foram conduzidos pelo *European Pipeline Research Group*, do Reino Unido, *Gas Corporation*, *Centro Sviluppo Materiali* e *Battelle Institute*, durante a década de 1970 (FEARNEHOUGH, 1974; GROVES; BISHNOI; WALLBRIDGE, 1978). No entanto, esses tipos de testes de rompimento em escala real eram extremamente caros. Portanto, na tentativa de reduzir os gastos foi proposto o estudo do comportamento do fluxo associado a liberações a alta pressão utilizando testes de tubo de choque.

O tubo de choque consiste em peças de carretel de tubo de aço e uma estação de compressão (BOTROS et al., 2010a). A descompressão repentina é desencadeada por uma ruptura de disco calibrado para romper em uma pressão específica (BOTROS et al., 2010a). Este disco (Figura 2) é colocado em um suporte na extremidade do tubo de choque. Após a ruptura, a onda de descompressão se propaga em direção à outra extremidade do tubo. A propagação é monitorada ao longo do tempo por uma série de transdutores de pressão de resposta de alta frequência colocados ao longo do tubo em intervalos conhecidos.

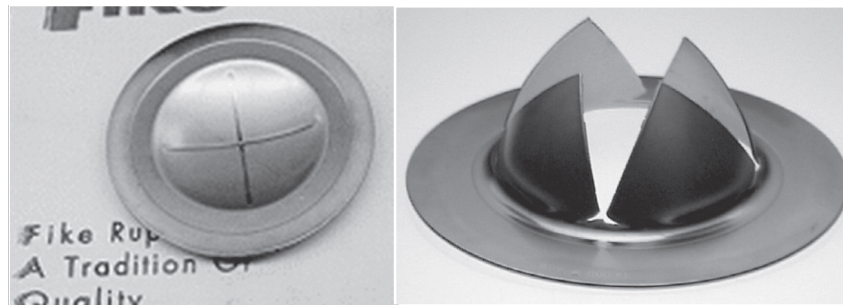


Figura 2 – Disco de ruptura antes e depois da ruptura.

Fonte: Botros et al. (2004).

Drescher et al. (2014) conduziram um teste de tubo de choque para despressurização de misturas de  $CO_2 - N_2$ . As frações de volume de  $N_2$  foram 10, 20 e 30, respectivamente.

As condições iniciais do experimento foram aproximadamente 12 MPa e 293,15 K para todos os casos. O tubo usado tinha cerca de 140 m de comprimento e o diâmetro interno era de 10 mm.

De 2001 a 2010, [Botros et al. \(2010a\)](#) e [Botros et al. \(2010b\)](#) realizaram uma série de testes de tubo de choque e modelaram o comportamento de descompressão de gasodutos. Na maioria dos testes, a seção principal do tubo de choque tinha 30 m de comprimento e o diâmetro interno era 49,325 mm. O tubo foi equipado com fluido e o disco de ruptura estava na extremidade frontal do tubo de choque. No momento do corte do disco de ruptura, o tubo foi aberto para a atmosfera e uma onda de descompressão propagou-se pelo tubo. Os testes foram realizados com pressões variando de 10 a 30 MPa. A seção principal do tubo tinha uma superfície extremamente lisa, a fim de minimizar efeitos de fricção e para melhor simular o comportamento de dutos de maior diâmetro.

Por conseguinte, é essencial obter-se os parâmetros na saída do duto, incluindo a taxa de fluxo de saída, pressão, temperatura e frações molares de cada espécie do gás. Esses dados podem também ser tratados como entradas para prever a expansão atmosférica subsequente e dispersão.

## 2.2 Expansão à pressão atmosférica

O fluido liberado de uma tubulação de alta pressão será imediatamente seguido por um fluxo de jato subexpandido saindo da abertura de ruptura para o ambiente com quantidade de movimento alto. Normalmente, a estrutura de fluxo apresenta uma região típica de choque em forma de barril ([TANG et al., 2017](#)) e a região limite de transição denominada disco de *Mach* ([ABDELHAMID; DOSANJH, 1969](#)), correspondente a um choque normal (ilustrado pela [Figura 3](#)). A montante do disco de *Mach* o fluxo é supersônico, enquanto a jusante do disco de *Mach* o fluxo é subsônico. A localização do disco de *Mach* pode ser determinada empiricamente pela [Equação 2.1](#) ([FRANQUET et al., 2015](#)):

$$X_{Mach} = 0,645d_{lib}\sqrt{\frac{p_{lib}}{p_{amb}}} \quad (2.1)$$

onde  $d_{lib}$  é o diâmetro da abertura de ruptura.

A região entre a ruptura e o disco de *Mach* é a zona de expansão mostrada na [Figura 3](#), onde a estabilização do jato ocorre em aproximadamente 40  $\mu s$  ([TANG et al., 2017](#)). A jusante do disco de *Mach*, a pressão do jato atingirá a pressão ambiente. Tendo obtida as propriedades na abertura de ruptura, as condições do jato à pressão ambiente podem ser usadas como variáveis de entrada para a modelagem de dispersão subsequente,

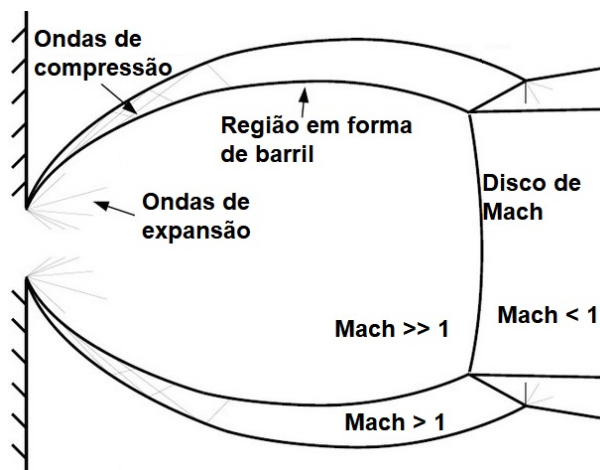


Figura 3 – Detalhes da formação do disco de *Mach* no fenômeno de expansão.

Fonte: Adaptado de [Margaritis \(2017\)](#).

no modelo de dispersão, o fluido de estudo pode ser tratado como incompressível e a região supersônica pode ser removida.

[Birch, Hughes e Swaffield \(1987\)](#) e [Sand, Sjøen e Bakke \(1996\)](#), assumiram que as forças viscosas são desprezíveis sobre a superfície de expansão e, em segundo lugar, que há uma entrada desprezível de ar ambiente, além disso as mudanças abruptas da pressão e temperatura causadas nesse fenômeno necessitam de uma equação de estado apropriada para descrever as variações da massa específica.

Em física e termodinâmica, uma equação de estado é uma equação constitutiva que fornece uma relação matemática entre duas ou mais variáveis de estado associadas a matéria, como sua temperatura, sua pressão, seu volume ou sua energia interna.

Muitos tipos diferentes de equações de estado são usados nas indústrias de dutos ([COSHAM; EIBER; CLARK, 2010; KUNZ et al., 2007](#)). Em 1845, *Victor Regnault* desenvolveu uma equação para gás ideal ([POLING; PRAUSNITZ; O'CONNELL, 2001](#)). *Victor Regnault* aplicou a hipótese de Avogadro sobre o volume ocupado por um mol de um gás ideal, obtendo como expressão,  $PV = nRT$  na qual  $n$  é o número de moles de gás e  $R$  é uma constante chamada constante universal dos gases que é independente do tipo de gás. Esta equação demonstra o conceito de relacionamento entre pressão, temperatura e massa específica ([POLING; PRAUSNITZ; O'CONNELL, 2001](#)). A equação de estado do gás ideal é aproximadamente precisa para gases em baixas pressões e altas temperaturas ([POLING; PRAUSNITZ; O'CONNELL, 2001; SMITH; NESS; ABBOTT, 1996](#)). No entanto, em pressões maiores e temperaturas menores, como a condição de operação dos dutos pressurizados, a equação de gás ideal torna-se inviável ([ORBEY; SANDLER, 1998](#)).

As equações de gases reais em sua maioria constitui de uma relação empírica ou

semi-empírica, que se baseia em primeiro lugar na lei do gás ideal e modificada para se conformar aos dados experimentais (SMITH; NESS; ABBOTT, 1996). Dentre as equações de estado de gás real mais utilizadas na literatura destacam-se as de *Redlich e Kwong (RK EOS)* (HORVATH, 1974), *Soave (SRK EOS)* (SOAVE, 1972), *Peng-Robinson (PR EOS)* (PENG; ROBINSON, 1976) e *Span e Wagner (SPAN; WAGNER, 1996)*. As equações de estado para gases reais citadas anteriormente estão presentes na maioria dos *softwares* comerciais, o resultado obtido com cada equação pode variar significativamente em função do escoamento estudado, cabe ao pesquisador observar em qual delas as propriedades foram melhor representadas, comparando sempre os resultados com os experimentos ou simulações numéricas existentes.

## 2.3 Dispersão do gás na atmosfera

Um modelo de dispersão atmosférica é normalmente usado para estimar a dispersão de uma fonte pontual na suposição de que a pluma está dispersa por um ambiente. O modelo deve conter os efeitos de advecção (transporte), turbulência, vento e concentração das espécies do gás de estudo. *Span e Wagner (1996)* utilizaram o modelo baseado em suposições gaussianas, que por sua vez não era adequado para representar a dispersão ao longo de terrenos que continham obstáculos, lançamentos a alta velocidade e com flutuações nas variáveis em função do tempo (ERBRINK, 1991; HANNA; BRITTER; FRANZESE, 2003). Além disso, o modelo gaussiano falha em descrever o fluxo de gás mais pesado do que o ar, o comportamento de uma nuvem mais densa que o ar o torna perigoso para a segurança dos seres vivos, pois tende a se depositar sobre o solo e permanecer com um nível de concentração elevado por um período de tempo.

Nas últimas décadas, a simulação de Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) tem sido amplamente utilizada como método de análise de dispersão de gases. O CFD geralmente tem um desempenho melhor do que outros modelos porque permite a simulação de processos físicos complexos que envolvem calor e transporte de massa em domínios computacionais complicados (MAZZOLDI; HILL; COLLS, 2008), embora o tempo para geração dos resultados seja relativamente maior se comparado aos modelos analíticos.

*Riddle et al. (2004)* observaram que os modelos numéricos são mais apropriados em terrenos complexos (que contém obstáculos). *Labovský e Jelemenský (2010)* verificaram que os resultados das simulações são afetados pelas condições de contorno. *Tauseef, Rashtchian e Abbasi (2011)* usaram CFD para simular a dispersão na presença de obstáculos e compararam diferentes modelos de turbulência, verificou-se que o modelo  $k - \varepsilon$  realizável foi o mais adequado e permitiu a previsão mais próxima das descobertas reais em termos de perfis de concentração espacial e temporal.

*Mazzoldi, Hill e Colls (2011)* compararam as simulações de dispersão de gás por duas

classes de modelos de dispersão atmosférica (modelo *Gaussiano* e modelos numéricos). O modelo numérico foi utilizado para simular uma liberação em alta velocidade com velocidades especificadas com o objetivo de avaliar o efeito da dispersão inicial do gás no comprimento a favor do vento atingido pelas concentrações tóxicas do poluente. Os resultados mostraram uma redução do risco envolvido no transporte de gás em até uma ordem de magnitude, ao modelar as mesmas liberações com uma ferramenta CFD, em comparação com os modelos gaussianos mais amplamente usados. Foram apresentadas sugestões para a preparação futura de Avaliações de Risco.

Pontiggia et al. (2011) modelaram um certo caso de dispersão do GLP (gás liquefeito de petróleo) em áreas urbanas usando o programa *Fluent*. Eles simplificaram o modelo geométrico. Edifícios e árvores eram considerados corpos sólidos cujos pequenos detalhes foram negligenciados. Uma malha não estruturada com elementos tetraédricos foi utilizada. Os autores acharam que o resultado foi bom e um modelo CFD seria capaz de fornecer previsões realistas de dispersão de nuvem densa resultante de uma grande liberação de GLP em uma área urbana congestionada.

## 2.4 Estado da Arte

Muitos são os desafios para correta modelagem dos fenômenos de vazamento de gases pressurizados em tubulações (gasodutos), nos últimos anos, vários foram os avanços nessa área. Os trabalhos de Wareing et al. (2012) e Witlox, Harper e Oke (2009), adotaram métodos analíticos que se baseiam no modelo HEM (*Homogeneous Equilibrium Model*), que considera que a velocidade, temperatura e pressão das fases são iguais e obtiveram resultados consistentes, mas com limitações no que diz respeito a aplicação para tubulações em diâmetros de vazamentos menores (MARTYNOV et al., 2014). Outro modelo analítico que é vastamente utilizado proposto por Bilicki e Kestin (1990) e que conseguiu atender a vazamentos com diâmetros menores foi o modelo HRM (*Homogeneous Relaxation Model*), que manteve o pressuposto de equilíbrio mecânico, além disso, mudanças na temperatura são controladas por efeitos de não-equilíbrio entre as fases líquida e de vapor e pela metastabilidade de líquido antes da evaporação.

Além dos modelos analíticos, as técnicas CFD têm sido amplamente utilizadas nos estudos de liberações de gás de alta pressão devido à disponibilidade de recursos de computação aprimorados. Chuech, Lai e Faeth (1989) investigaram a estrutura de jatos sub-expandidos usando simulações numéricas, bem como métodos experimentais. Foi proposta uma versão do modelo de turbulência  $k - \varepsilon$ , que introduziu um fator de correção de compressibilidade para a viscosidade turbulenta. Eles descobriram que o modelo CFD produziu resultados encorajadores. Sand, Sjøen e Bakke (1996) e Novembre, Podenzani e Colombo (2006) estudaram liberações acidentais de gás natural em dutos de alta pressão.

Em seu trabalho, a dispersão em campo distante também foi investigada. Nesses estudos, os fluidos foram modelados como gases ideais. Este tratamento simplificou consideravelmente o problema, mas não é apropriado na previsão correta dos parâmetros de vazamento, isso ocorre porque a equação de estado de gás ideal não consegue refletir com precisão as propriedades termodinâmicas dos gases em pressões muito altas ou temperaturas muito baixas. Wareing et al. (2013) e Woolley et al. (2013) descobriram que uma equação de gás real era consideravelmente superior à de gás ideal na previsão da temperatura de campo próximo e perfis de velocidade de fluxos de jatos, ou seja, para os fenômenos de despressurização e expansão. Atualmente, há muitas equações de gás real disponíveis que podem prever com precisão o comportamento somente de vapor ou de líquido-vapor do escoamento, isso fornece uma melhor perspectiva para a simulação da liberação de gases pressurizados (LI; YAN, 2009; LI et al., 2011).

Liu et al. (2016) realizou o estudo completo do vazamento de gases pressurizados através do rompimento total de tubulações utilizando CFD, destaca-se que cada modelo foi bem representado utilizando a ferramenta numérica e validado apenas de maneira qualitativa e por isso não houve um teste estatístico para validação quantitativa durante o desenvolver do trabalho.

Em relação aos experimentos existentes na literatura, foi escolhido um para de cada fenômeno de vazamento, dentre eles os experimentos de Botros, Geerligts e Eiber (2010), Eggins e Jackson (1974) e Davies e Singh (1985) foram utilizados com o intuito de realizar as validações dos modelos numéricos de despressurização, expansão e dispersão respectivamente nos Capítulo 3, Capítulo 4 e Capítulo 5 para isso destaca-se o *software* escolhido para realizar os modelos numéricos propostos assim como a contribuição para a literatura da modelagem suplementar utilizada, no ??.

### 3 Modelagem do Fenômeno de Despressurização

Depois que o duto se rompe, a pressão e a velocidade do gás dentro do duto variam muito, com isso os perigos associados à falha acidental de gasodutos devem ser quantificados e medidas apropriadas devem ser tomadas para trazer suas consequências a níveis aceitáveis (BROWN et al., 2013). Por conseguinte, obter os parâmetros no plano de ruptura é essencial, incluindo a taxa de fluxo de saída, pressão, temperatura e frações molares de cada espécie. Esses dados também podem ser tratados como entradas para prever a subsequente expansão e dispersão atmosférica.

Nas últimas décadas, diversos modelos numéricos para a previsão da despressurização em dutos de alta pressão foram realizados, os estudos apontaram como principais considerações o escoamento sem atrito, isentrópico e compressível, necessitando de uma equação de estado de gás real apropriada (LIU et al., 2018; COSHAM et al., 2012; LU et al., 2012).

O experimento utilizado como base de validação do modelo numérico proposto nesta seção foi o conduzido por Botros et al. (2004). Os dados experimentais fornecidos pela instalação do *Gas Dynamics Test* do gasoduto *TransCanada* foram usados para validar o modelo de descarga. O tubo tem 30 m de comprimento e diâmetro interno de 49,325 mm (Figura 4). A pressão e a temperatura iniciais foram 10,41 MPa e 274,22 K (1,07 °C), respectivamente. Vários sensores de pressão foram instalados para monitorar o campo de pressão durante o tempo. No presente modelo os transdutores P1 e P8 localizados a 0,399 m e 1,149 m do disco de ruptura respectivamente, foram comparados para a validação do modelo proposto. A Tabela 1 mostra a composição do gás natural que foi utilizado neste experimento.

Tabela 1 – Composição para o gás natural utilizado no experimento (BOTROS et al., 2004).

Gás	C1	C2	C3	i-C4	n-C4	i-C5	n-C5	N <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>
<b>Composição</b>	92,955	4,076	0,8	0,099	0,137	0,066	0,073	0,697	1,097

Fonte: Adaptado de Botros et al. (2004).

O *software* selecionado para resolver numericamente os fenômenos de vazamento foi o *Ansys Fluent*, ele fornece as ferramentas ideais para simular com sucesso o comportamento do escoamento de fluidos, mesmo com interações complexas entre diversas físicas e analisar com precisão os resultados obtidos ao final delas. *Softwares* de simulação são muito importantes para confecção de protótipos em diversos setores da indústria, e sua utilização

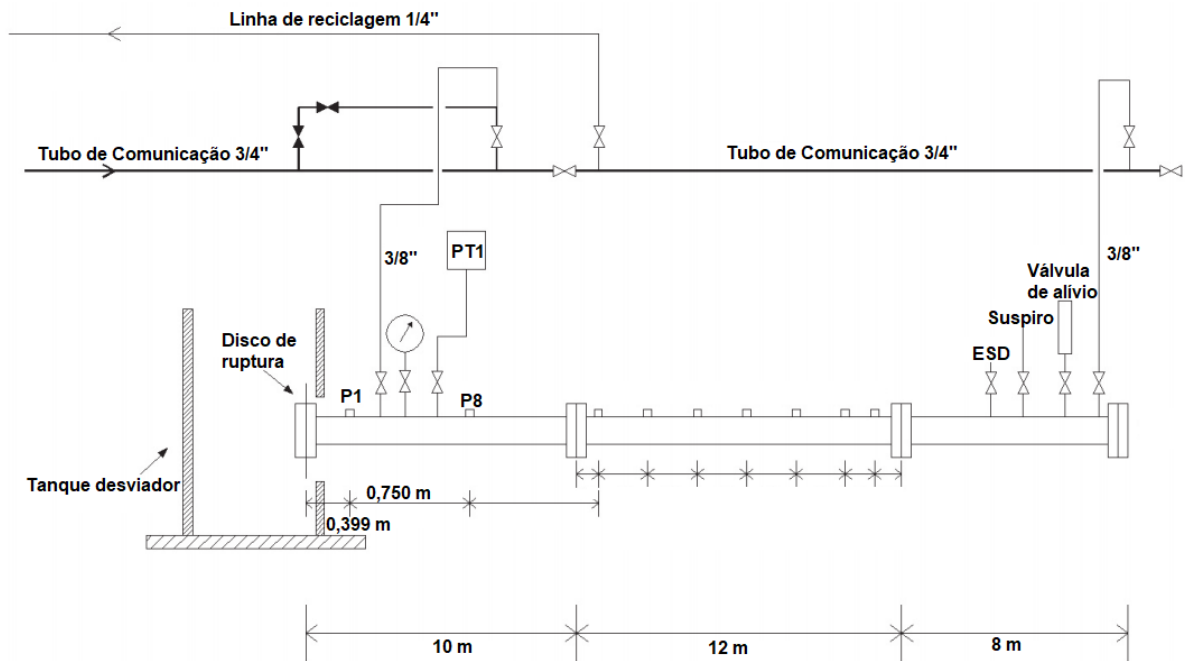


Figura 4 – Escopo do experimento realizado por Botros et al. (2004).

Fonte: Adaptado de Botros et al. (2004).

torna possível avaliar as condições de funcionamento ou de rompimento de um equipamento antes ou depois que ele foi fabricado. Portanto, entender como um processo vai se comportar traz benefícios como a redução de custos, bem como economia de tempo, e tudo isso que contribui para a otimização do processo (MATSSON, 2021).

As próximas subseções destacam todos os métodos realizados para a validação do modelo proposto para o fenômeno de despressurização, destacando a geometria, malha, condições de contorno, equacionamento, métodos de solução e resultados.

### 3.1 Geometria e Malha

A geometria foi realizada replicando os valores do comprimento da tubulação de 30 m e raio igual a 24,6625 mm, portanto foi feita uma geometria bidimensional com um eixo de simetria axial, dessa forma foi possível reduzir o tempo computacional se comparado a uma mesma geometria tridimensional, além disso, uma região fora da tubulação representando a atmosfera foi realizada com o intuito de aliviar os gradientes durante as simulações, pois logo na saída da tubulação considerar uma condição de contorno não iria representar bem a física do problema, já que a pressão ambiente só é alcançada no disco de *Mach*. Para representar os sensores de pressão P1 e P8, foram feitas linhas nas suas respectivas posições (0,399 m e 1,149 m da saída para atmosfera), onde um valor médio de pressão era anotado a cada passo de tempo. O trecho final da geometria pode ser observado na Figura 5, nela destaca-se a posição dos sensores e a região do domínio que representa a



atmosfera.

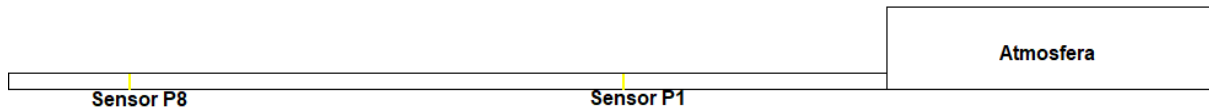


Figura 5 – Trecho final da geometria destacando os sensores de pressão e a saída da tubulação para a atmosfera.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Com a geometria realizada, a malha foi dividida em 2 etapas como pode ser observado pela Figura 6. Para a malha na tubulação (Figura 6a) foram feitas 10 divisões na direção vertical e para a direção horizontal ela foi refinada mais próxima a saída para a atmosfera. Na região que representa a atmosfera (Figura 6b) o refino aconteceu na direção vertical seguindo o raio da tubulação e ficou mais grosseira no topo desta geometria totalizando 101386 elementos.

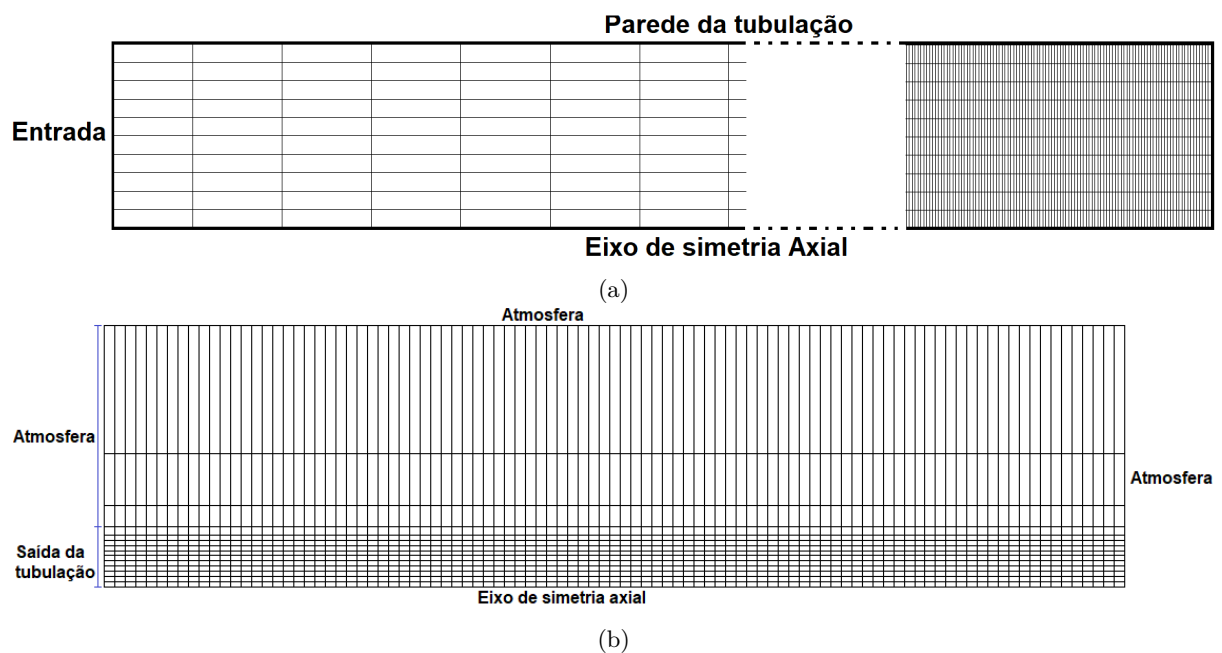


Figura 6 – (a) Detalhamento da Malha na tubulação e na (b) Atmosfera

Fonte: Elaborado pelo autor.

Para a Figura 6a a região de entrada teve como condição de contorno pressão e temperatura iguais a 10,41 MPa e 274,22 K, o eixo de simetria axial foi imposta a condição de “axisimetria”, não deslizamento na região de parede e a saída da tubulação ficou como uma região de interior justamente por conta de que nesta região não há uma condição específica a ser colocada, por isso a região fora da tubulação foi realizada (Figura 6b) com o intuito de aliviar os gradientes e melhorar os resultados, nela as regiões denominadas atmosfera tiveram como condição pressão e temperatura ambiente (101325 Pa e 298,15 K) e o eixo de simetria axial teve a mesma condição de “axisimetria” como apresentado anteriormente.

A ferramenta *patch* presente no *Fluent* foi utilizada com o intuito de delimitar a fronteira entre a tubulação e a atmosfera e aplicar suas respectivas condições iniciais nos elementos da malha, ou seja, na região da tubulação foram impostas as condições de pressão e temperatura de estagnação iguais a 10,41 MPa e 274,22 K e na região que representa a atmosfera foram impostas as condições iniciais de 101325 Pa e 298,15 K. Este método complementar também foi utilizado no modelo de expansão e para maiores informações sobre a aplicação dessa ferramenta, consulte o Anexo A.

## 3.2 Equacionamento

No modelo em questão foram utilizadas as equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e espécies, modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  padrão, equação de estado de *Peng-Robinson* e ainda a utilização de um termo fonte na equação de quantidade de movimento para quantificar os efeitos do empuxo em virtude da mudança da massa específica provocada pela equação de *Peng-Robinson* (ANSYS, 2016).

A equação de conservação de massa para uma geometria bidimensional com um eixo de simetria axial é escrita pela [Equação 3.1](#):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial r} (\rho v_r) + \frac{\rho v_r}{r} = S_m \quad (3.1)$$

onde  $\rho$  é a massa específica do fluido,  $x$  é a coordenada axial,  $r$  é a coordenada radial,  $v_x$  é a velocidade axial,  $v_r$  é a velocidade radial e  $S_m$  é o termo fonte da massa transferida da fase contínua para a dispersa.

As equações de conservação da quantidade de movimento axial e radial são dadas respectivamente pela [Equação 3.2](#) e [Equação 3.3](#)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho v_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} (r \rho v_x v_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v_r v_x) = \\ & -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[ r \mu_t \left( 2 \frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \right) \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \mu_t \left( \frac{\partial v_x}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial x} \right) \right] + F_x \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} (r \rho v_x v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v_r v_r) = \\ & -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[ r \mu_t \left( \frac{\partial v_r}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial r} \right) \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \mu_t \left( 2 \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \right) \right] \\ & - 2 \mu_t \frac{v_r}{r^2} + \frac{2}{3} \frac{\mu_t}{r} (\nabla \cdot \vec{v}) + \rho \frac{v_z^2}{r} + F_r \end{aligned} \quad (3.3)$$

onde,  $p$  é a pressão estática,  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta,  $F_x$  e  $F_r$  são respectivamente as forças de corpo na direção axial e radial,  $(\nabla \cdot \vec{v})$  é o divergente da velocidade que é escrito pela [Equação 3.4](#):

$$(\nabla \cdot \vec{v}) = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_r}{r} \quad (3.4)$$

Tem-se que na [Equação 3.3](#)  $v_z$  é a velocidade de rotação dada pela [Equação 3.5](#):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho v_z) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} (r \rho v_x v_z) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v_r v_z) = \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[ r \mu \frac{\partial v_z}{\partial x} \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^3 \mu \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_z}{r} \right) \right] - \rho \frac{v_r v_z}{r} \end{aligned} \quad (3.5)$$

A equação da conservação de energia é descrita pela [Equação 3.6](#):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v} (\rho E + p)) = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) + S_{rad} \quad (3.6)$$

onde  $S_{rad}$  é o termo fonte de calor por radiação,  $k_{eff}$  condutividade térmica efetiva e a energia  $E$  é dada pela [Equação 3.7](#):

$$E = h - \frac{P}{\rho} + \frac{|\vec{v}^2|}{2} \quad (3.7)$$

onde  $h$  é a entalpia.

A equação de conservação de espécies é dada pela [Equação 3.8](#):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \bar{J}_i \\ \bar{J}_i = - \left( \rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_i - D_{t,i} \frac{\nabla T}{T} \end{aligned} \quad (3.8)$$

onde  $Y_i$  é obtido através da solução de uma equação de convecção-difusão para a  $i$ -ésima espécie,  $J_i$  é o fluxo de difusão das espécies  $i$  e  $D_t$  é a difusividade turbulenta.

O número de Schmidt turbulento é calculado usando:

$$Sc_t = \frac{\mu_t}{\rho D_t} \quad (3.9)$$

e a difusividade turbulenta  $D_{t,i}$  é calculada usando:

$$D_{t,i} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial \overline{v_i v_j}}{\partial x_k} \right) \quad (3.10)$$

O valor padrão de  $Sc_t$  é 0,7 e  $\sigma_k = 0,82$ .

O modelo de turbulência escolhido foi o  $k - \varepsilon$  padrão devido a sua simplicidade, que é dado respectivamente, pela energia cinética turbulenta  $k$  (Equação 3.11) e pela dissipação  $\varepsilon$  (Equação 3.12):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k v_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + 2\mu E_{ij} E_{ij} - \rho \varepsilon \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon v_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu E_{ij} E_{ij} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.12)$$

onde  $v_i$  representa a componente da velocidade na direção correspondente,  $E_{ij}$  representa a componente da taxa de deformação,  $\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$  representa a viscosidade turbulenta.

A Equação 3.11 e Equação 3.12 tem constantes ajustáveis, onde seus valores foram obtidos por numerosas iterações de ajuste de dados para uma ampla gama de fluxos turbulentos, e são os seguintes:

$$\begin{aligned} C_\mu &= 0,009; \sigma_k = 1,00; \sigma_\varepsilon = 1,30; \\ C_{1\varepsilon} &= 1,44; C_{2\varepsilon} = 1,92 \end{aligned} \quad (3.13)$$

Muitos tipos diferentes de equação de estado são usados na indústria de gases, o uso delas depende do fluido e da fase a ser analisada para o cálculo de suas propriedades termodinâmicas (COSHAM; EIBER; CLARK, 2010; KUNZ et al., 2007).

A equação de estado de gás ideal é aproximadamente precisa para gases, em baixas pressões e altas temperaturas (POLING; PRAUSNITZ; O'CONNELL, 2001; NESS et al., 2017), no entanto, em maiores pressões e temperaturas mais baixas, como a condição de operação de gasodutos ela não é tão eficaz.

A equação escolhida foi a de *Peng-Robinson* que é amplamente utilizada nos processos industriais, pode ser utilizada para simulação na fase gasosa, como tem uma forma simples e precisão comprovada na modelagem das propriedades termodinâmicas (PENG; ROBINSON, 1976). É uma equação cúbica e é descrita pela Equação 3.14:

$$p = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V^2 + 2bV - b^2} \quad (3.14)$$

Com:

$$\begin{aligned} a &= \frac{0.45724R^2T_c^2}{P_c} \left[ 1 + \kappa \left( 1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right]^2 \\ b &= \frac{0.0778RT_c}{P_c} \\ \kappa &= 0.37464 + 1.54226\xi - 0.26992\xi^2 \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde  $p$  é a pressão,  $T$  a temperatura absoluta,  $V$  o volume específico molar,  $R$  a constante de gás universal,  $\xi$  o 'fator acêntrico' do gás, e  $T_c$  e  $P_c$  a temperatura e a pressão no ponto crítico, respectivamente.

Como a variação da massa específica foi adotada seguindo o equacionamento apresentado acima, os efeitos do empuxo estão diretamente ligados a esta variação, em virtude disso um termo fonte foi implementado para a equação de conservação da quantidade de movimento para contabilizar esses efeitos e tem como relação a [Equação 3.16](#):

$$S = g \left( \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} \right) \quad (3.16)$$

Foi feita uma UDF que representasse os efeitos do empuxo com base na [Equação 3.16](#) e compilada junto ao caso proposto no *Ansys Fluent*. Todo o desenvolvimento do termo fonte da UDF e seu respectivo código estão presentes no Anexo [B](#).

### 3.3 Modelo estatístico

Para validação dos modelos numéricos, além da análise qualitativa dos resultados, foi realizada também em cada um deles a análise quantitativa em comparação aos dados experimentais através do método estatístico proposto por [Hanna, Chang e Strimaitis \(1993\)](#).

Esse método consiste na avaliação de dois índices estatísticos que são a média geométrica ( $MG$ ) e a variância geométrica ( $VG$ ), representadas respectivamente pela [Equação 3.17](#) e [Equação 3.18](#), onde  $C_{obs}$  é o valor obtido nas simulações numéricas e  $C_{exp}$  é o valor experimental de determinado parâmetro a ser comparado.

$$MG = e^{\left( \ln \left( \frac{C_{obs}}{C_{exp}} \right) \right)} \quad (3.17)$$

$$VG = e^{\left[ \left( \ln \left( \frac{C_{obs}}{C_{exp}} \right) \right)^2 \right]} \quad (3.18)$$

“Um modelo perfeito teria  $MG$  e  $VG$  iguais a 1, enquanto valores de  $MG$  de 0,5 e 2 podem ser pensados como “fator de dois” sobreprevisões e subprevisões na média, respectivamente” (HANNA; CHANG; STRIMAITIS, 1993). Dessa forma é possível analisar a porcentagem que cada um dos índices obtidos estão do fator 1, sendo essa porcentagem a eficiência do modelo numérico proposto. Este modelo foi utilizado também no [Capítulo 4](#) e [Capítulo 5](#) para requisitos de validação e que foram devidamente citadas. Ele foi escolhido pois os resultados obtidos se comportam de maneira semelhante a uma progressão geométrica, ou seja os gráficos obtidos são semelhantes a uma curva e portanto os parâmetros da  $MG$  e  $VG$  são eficazes para representar a efetividade dos modelos numéricos propostos nessa dissertação, não impedindo que em futuros trabalhos outros modelos estatísticos possam ser testados e comparados a este.

### 3.4 Métodos de solução

O solucionador baseado em densidade foi escolhido para solução do modelo proposto, embora o solucionador baseado em pressão seja aplicado a uma ampla gama de fluxos, o solucionador baseado em densidade tem uma precisão maior para fluxos compressíveis de alta velocidade, além disso, o solucionador baseado em densidade pode prever corretamente as condições de estrangulamento na saída do tubo durante a despressurização (VENDRIG et al., 2003; KUNZ et al., 2007), um resumo de todos os métodos de solução utilizados podem ser vistos na [Tabela 2](#). O tamanho do passo de tempo foi definido como 0,002 s com 60 iterações a cada passo de tempo, o critério de convergência da equação de energia é definido como  $10^{-6}$  e para as outras equações de  $10^{-3}$ . Primeiro a simulação foi inicializada em todas as zonas, depois na região da tubulação todos os elementos da malha presentes nesse setor tiveram sua pressão e temperatura alteradas para 10,41 MPa e 274,22 K, além das frações molares de cada espécie, da mesma forma a região que representa a atmosfera a pressão e a temperatura foram de respectivamente 101325 Pa e 298,15 K nos elementos desse setor, para isso foi utilizada a ferramenta *patch* como já apresentada. Todos os resultados foram obtidos seguindo esses procedimentos e detalhados na próxima seção.

### 3.5 Resultados

Após vários testes os resultados foram obtidos com o objetivo de validar a despressurização nos dois transdutores de pressão com o decorrer do tempo, com isso foram obtidos os gráficos das figuras [7](#) e [8](#) que mostram a relação entre a pressão e o tempo nos pontos de monitoramento P1 e P8. O modelo pode prever bem a queda de pressão ao longo do

Tabela 2 – Métodos de solução para o modelo de despressurização.

Métodos de solução		
Tratamento próximo a parede	Função de parede padrão	
Formulação	Explícita	
Tipo de fluxo	Roe-FDS	
Discretização espacial	Gradientes	<i>Least Squares Cell Based</i>
	<i>Flow</i>	Segunda ordem <i>upwind</i>
	Energia cinética turbulenta	Segunda ordem <i>upwind</i>
	Taxa de dissipação turbulenta	Segunda ordem <i>upwind</i>
Formulação transiente	Primeira ordem implícita	

Fonte: Elaborado pelo autor.

período de tempo estudado, a despressurização foi bem representada nos dois sensores obtendo comportamento bem próximo ao experimental. O teste estatístico também foi realizado obtendo erro médio máximo para os parâmetros da MG e VG para os sensores P1 e P8 de 8,88% e 5,91% respectivamente. Nota-se que o comportamento dos sensores são bem parecidos, há uma rápida queda de pressão em um curto espaço de tempo mais após isso a pressão tende a se estabilizar em aproximadamente 5 MPa, destacando que para o sensor P1 que está mais próximo a saída a pressão é relativamente mais baixa do que o sensor P8 que está mais distante da liberação.

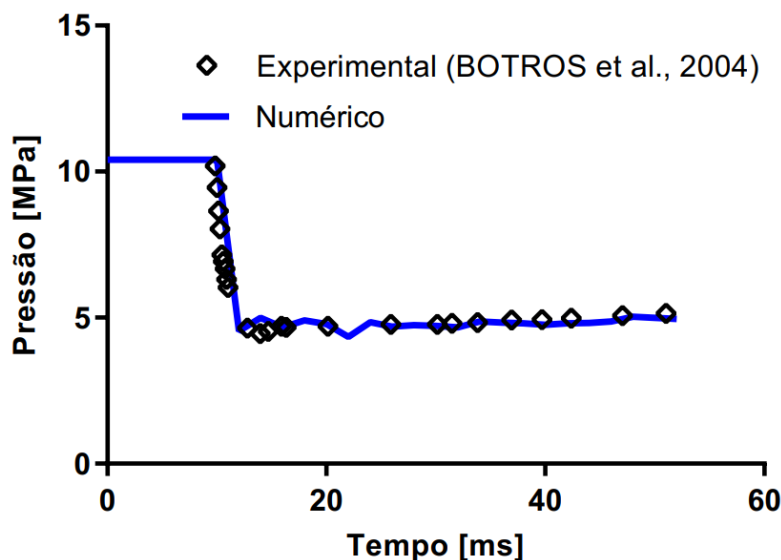


Figura 7 – Evolução da pressão no sensor P1, valores numéricos x valores experimentais.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Após as validações qualitativa e quantitativa apresentas anteriormente, foi gerado os contornos de velocidade (Figura 9) e temperatura (Figura 10), nota-se que mesmo a região fora da tubulação sendo criada apenas com o intuito de aliviar os gradientes durante as

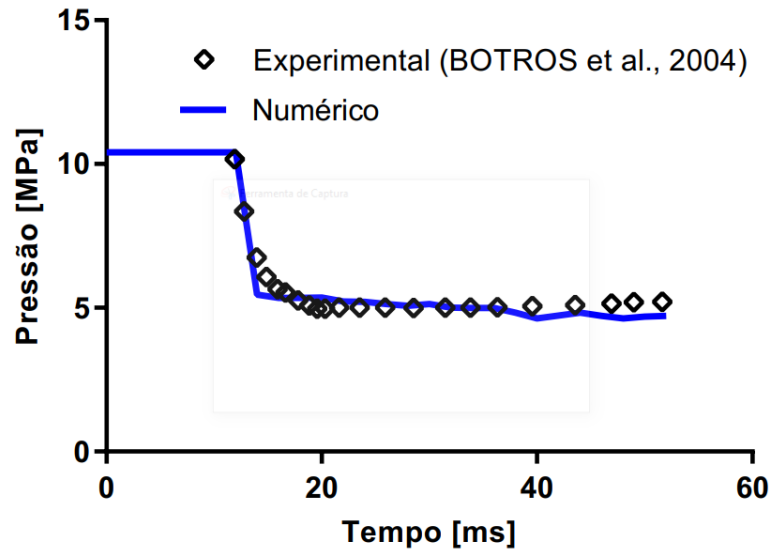


Figura 8 – Evolução da pressão no sensor P8, valores numéricos x valores experimentais.

Fonte: Elaborado pelo autor.

simulações e evitar uma condição de contorno para a saída da tubulação, representou bem a formação das principais regiões do fenômeno de expansão, ou seja, nota-se a formação de uma região de alta velocidade e baixa temperatura que é denominada região de choque em forma de barril (TANG et al., 2017) e também uma região de transição de  $Mach \gg 1$  para  $Mach \leq 1$  denominada disco de Mach (ABDELHAMID; DOSANJH, 1969), regiões essas que também foram obtidas na validação do fenômeno de expansão no Capítulo 4 mostrando a consistência do modelo proposto.

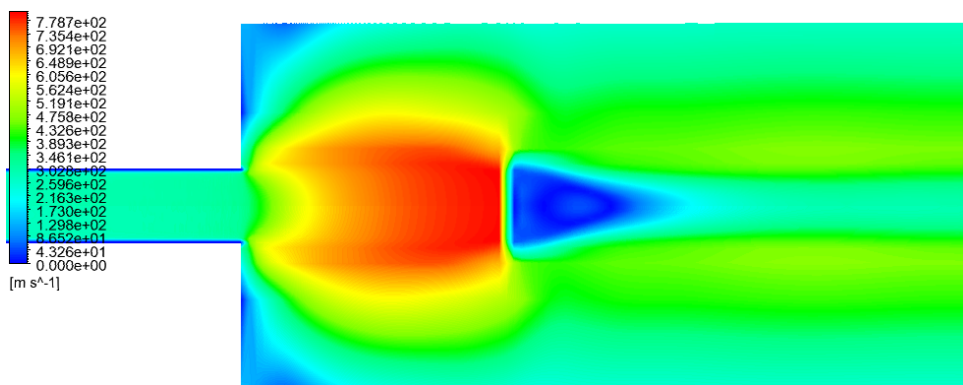


Figura 9 – Contorno de velocidade logo após a saída da tubulação.

Fonte: Elaborado pelo autor.



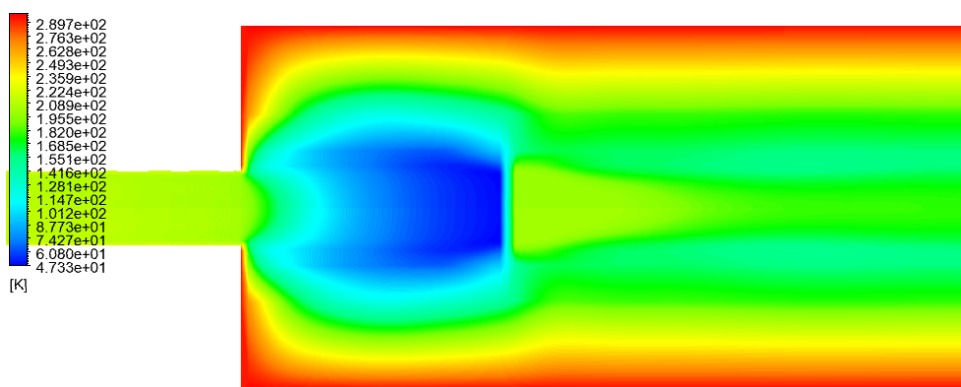


Figura 10 – Contorno de temperatura logo após a saída da tubulação.

Fonte: Elaborado pelo autor.

## 4 Modelagem do Fenômeno de Expansão

O fenômeno de expansão presente no vazamento de gases pressurizados é um estudo muito importante, pois envolve efeitos de compressibilidade, altos gradientes de velocidade, temperatura e pressão, além disso, há a formação da região em forma de barril (onde  $Mach \gg 1$ ) (TANG et al., 2017) e da região limite de transição denominada “disco de *Mach*” (ABDELHAMID; DOSANJH, 1969). Essas sub-regiões, bem como os perfis de velocidade a montante e a jusante do disco de *Mach* são parâmetros difíceis de obter com precisão, necessitando de um modelo que consiga determinar as características desse tipo de escoamento.

A ruptura de uma tubulação de gás a alta pressão será seguida imediatamente pelo início de uma onda de descompressão dentro da tubulação e uma expansão saindo do orifício (saída da tubulação) para o ambiente com quantidade de movimento muito alto afetando a dispersão subsequente na atmosfera. O modelo de gás ideal não pode refletir com precisão as propriedades em pressões altas ou temperatura baixas, essas situações são muito comuns durante a liberação de um gasoduto. Ao usar o *Ansys Fluent*, um modelo de gás real pode ser utilizado para modelar com precisão as propriedades do gás. Nesta parte, a equação de *Peng-Robinson* (PENG; ROBINSON, 1976) foi utilizada para prever as variações de massa específica, além disso, o escoamento é modelado em regime permanente devido a rápida estabilização do jato, ocorrendo em aproximadamente  $40 \mu s$  (TANG et al., 2017), essas considerações são importantes para obter os parâmetros na região fora da tubulação, dessa forma o presente modelo poderá auxiliar na avaliação da posterior dispersão.

Para representar o fenômeno de expansão o modelo numérico proposto teve como princípio o escoamento de um fluido pressurizado através de um bico convergente utilizando como base de comparação o experimento de jato de ar conduzido por Eggins e Jackson (1974) para posterior validação qualitativa e quantitativa. No experimento (EGGINS; JACKSON, 1974), ar de alta pressão foi liberado de um bico convergente com um diâmetro de saída de 2,7 mm, pressão e temperatura de liberação respectivamente iguais a 6,6 atm e 293 K. As medições do campo de velocidade foram feitas usando a técnica *Fabry-Perot Laser-Doppler*.

As posteriores subseções descrevem o desenvolvimento da geometria, malha, condições de contorno, equacionamento, métodos de solução e por fim os resultados com as validações qualitativa e quantitativa do modelo.

## 4.1 Geometria e malha

Para representar corretamente o bico convergente utilizado no experimento, foi gerada uma geometria em domínio bidimensional com um eixo de simetria axial representada pela Figura 11, assim é possível reduzir o esforço computacional durante as simulações numéricas.

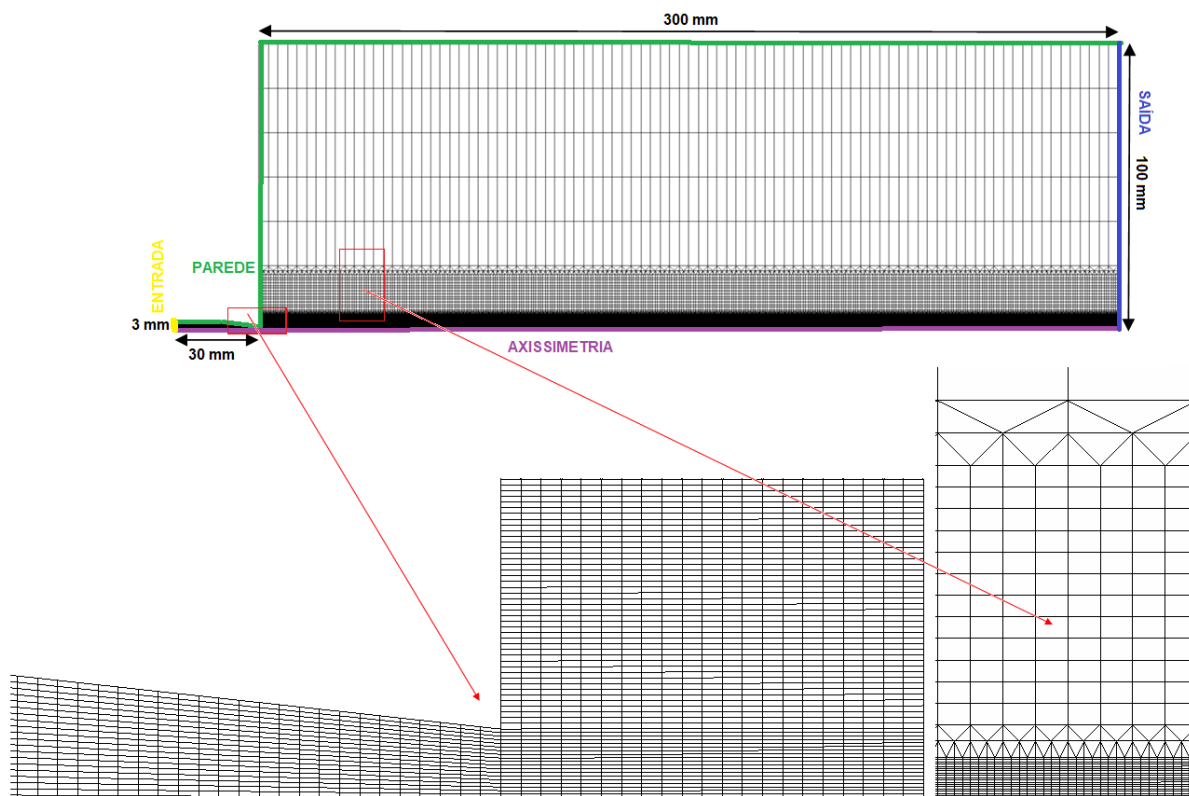


Figura 11 – Geometria e malha para o modelo de expansão

Fonte: Elaborado pelo autor.

O domínio é composto por um bico convergente com diâmetro de saída igual a 2,7 mm operando a uma pressão de 6,6 atm com saída para atmosfera (representada pelo domínio retangular (100 mm x 300 mm)), a malha foi feita visando capturar melhor o comportamento da saída do bico para a atmosfera, por isso foram feitas quatro transições como pode ser mostrada pelas regiões ampliadas da Figura 11, pode-se observar que quanto mais próximo do bico mais refinada é a malha assim tem-se o melhor aproveitamento da quantidade de elementos evitando possíveis indeterminações decorrentes de gradientes nulos reduzindo assim o tempo de processamento das simulações totalizando assim 57710 elementos.

Como condições de contorno para cada uma das regiões mostradas pela Figura 11 tem-se:

- **Entrada (Linha Amarela):** Temperatura e pressão prescritas;

- **Parede (Linhas Verdes):** Não deslizamento e adiabática;
- **Eixo de simetria axial (Linha roxa):** Gradientes nulos;
- **Saída (Linha azul):** Temperatura e pressão ambiente;

Algumas das considerações utilizadas foram que o sistema esteja em regime permanente, pois a estabilização do jato ocorre em aproximadamente  $40 \mu s$  (TANG et al., 2017), também foi considerado que a entrada de ar e forças viscosas na zona de expansão são desprezíveis (SAND; SJØEN; BAKKE, 1996).

Alguns resultados preliminares mostraram que a malha precisava ainda de um refino específico logo na região de saída, devido ao alto gradiente de pressão e velocidade, em virtude disso foi utilizada uma malha adaptativa que capturasse melhor os gradientes dessas variáveis, obtendo assim a configuração apresentada na Figura 12, esse refino específico resultou em uma melhora significativa nos resultados que serão mostrados na seção 4.4 totalizando 104502 elementos. Para maiores informações da implementação e do impacto causado pela aplicação da malha adaptativa, consulte Anexo C.

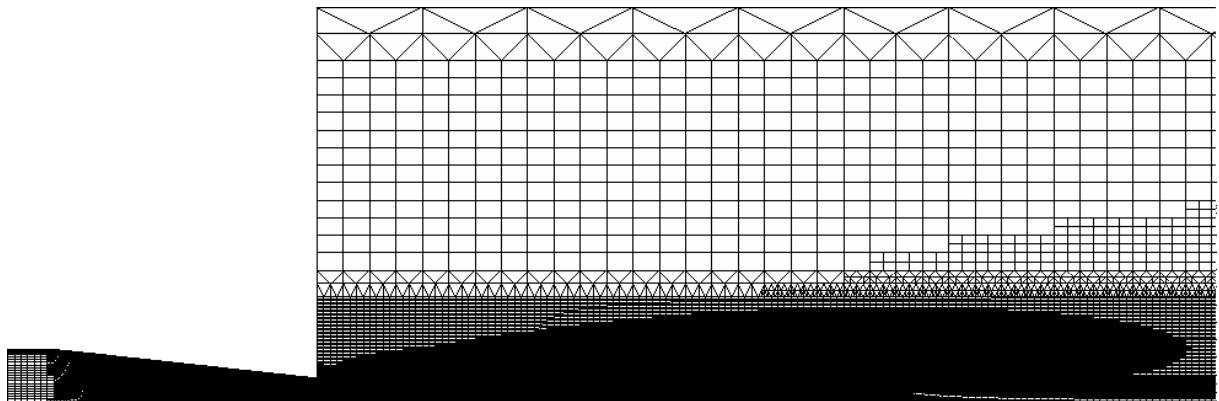


Figura 12 – Malha adaptativa para o modelo de expansão

Fonte: Elaborado pelo autor.

## 4.2 Equacionamento

No modelo em questão foram utilizadas as mesmas equações descritas no Capítulo 3 exceto a equação de conservação de espécies pois o experimento (EGGINS; JACKSON, 1974) utilizou o ar como fluido de estudo, ou seja, as equações foram as de conservação de massa (Equação 3.1), quantidade de movimento (Equação 3.2 e Equação 3.3) e energia (Equação 3.6), modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  (Equação 3.11 e Equação 3.12), equação de estado de Peng-Robinson (Equação 3.14) e ainda a utilização do termo fonte (Equação 3.16) na equação de quantidade de movimento para quantificar os efeitos do empuxo em virtude da mudança da massa específica provocada pela equação de Peng-Robinson (ANSYS, 2016).

### 4.3 Métodos de solução

O solucionador baseado em pressão foi escolhido porque é compatível com o modelo bidimensional com eixo de simetria axial utilizado, ele emprega um algoritmo que pertence a uma classe geral de métodos chamada método de projeção (CHORIN, 1968). No método de projeção, a restrição de conservação de massa do campo de velocidade é obtida resolvendo uma equação de pressão (ou correção de pressão). A equação da pressão é derivada das equações da continuidade e da quantidade de movimento de forma que o campo de velocidade, corrigido pela pressão, satisfaça a continuidade. Uma vez que as equações governantes são não lineares e acopladas umas às outras, o processo de solução envolve iterações em que todo o conjunto de equações governantes é resolvido repetidamente até que a solução convirja até um resíduo proposto que nesse caso foi de  $10^{-4}$ , um resumo de todos os métodos de solução utilizados nas simulações são descritos na Tabela 3.

Tabela 3 – Métodos de solução para o modelo de expansão.

<b>Coupled para acoplamento pressão-velocidade</b>		
<b>Tratamento próximo a parede</b>	<i>Standard Wall Functions</i>	
	Gradientes	<i>Least Squares Cell Based</i>
	Pressão	Segunda ordem
<b>Discretização espacial</b>	Densidade	Segunda ordem <i>upwind</i>
	Momentum	Segunda ordem <i>upwind</i>
	Energia cinética turbulenta	Segunda ordem <i>upwind</i>
	Taxa de dissipação turbulenta	Segunda ordem <i>upwind</i>
	Energia	Segunda ordem <i>upwind</i>

Fonte: Elaborado pelo autor.

### 4.4 Resultados

Os resultados desta seção são referentes a todos os métodos apresentados anteriormente para o modelo de expansão. Primeiro foram feitas as análises visual e estatística dos resultados obtidos para o perfil de velocidade horizontal logo após a saída da tubulação. Após a validação qualitativa e quantitativa, foi realizada a comparação com o perfil de velocidade 0,2 mm a montante e a jusante do disco de *Mach* com suas respectivas validações.

Os resultados obtidos para o perfil e contorno de velocidade logo após a saída da tubulação são mostrados nas figuras 13 e 14 respectivamente, pode-se observar que os valores obtidos numericamente seguiram comportamento semelhante aos dados experimentais e, além disso, está visível a formação do disco de *Mach*, portanto a física do problema foi bem representada.

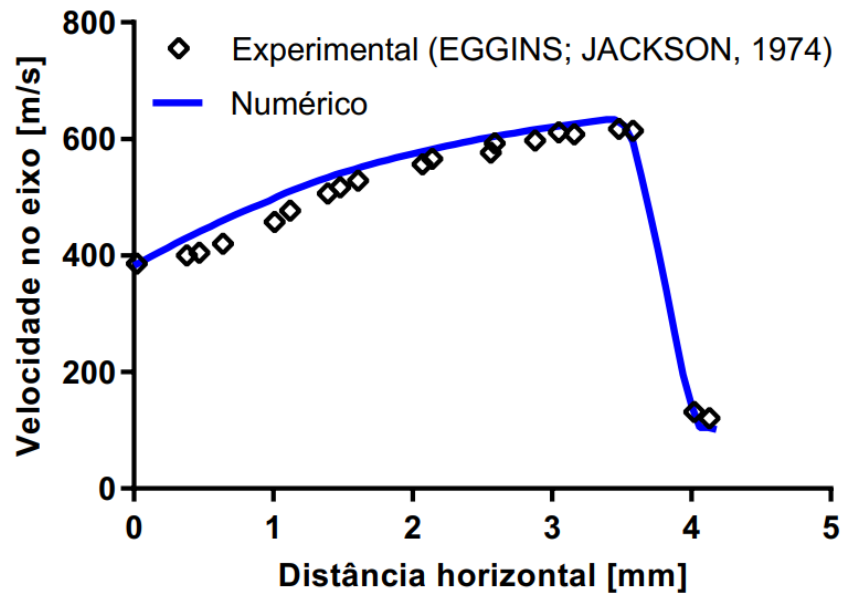


Figura 13 – Perfil de velocidade após a saída da tubulação.

Fonte: Elaborado pelo autor.

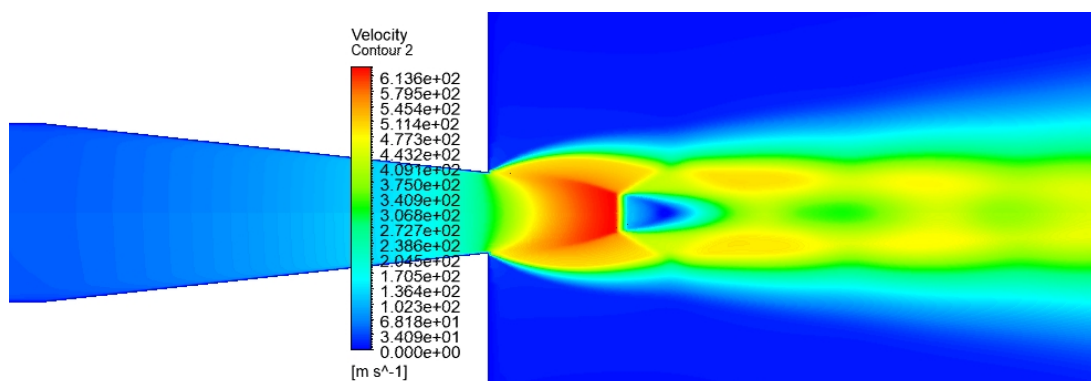


Figura 14 – Perfil de velocidade modelo expansão

Fonte: Elaborado pelo autor.

Verifica-se pelas figuras 13 e 14 que a velocidade é em torno de 380 m/s na saída do tubo, tendo um aumento gradativo com a distância até atingir o pico (cerca de 610 m/s) em torno de 3,8 mm. Depois disso, a velocidade cai significativamente e, em seguida, cai marginalmente com a distância, além disso, ocorre a formação da região de choque em forma de barril onde  $Mach \gg 1$  (TANG et al., 2017) e também a região de limite de transição chamada de “disco de Mach” (ABDELHAMID; DOSANJH, 1969) respeitando assim a física do problema.

Após a validação qualitativa apresentada nos parágrafos anteriores foi realizada também a análise quantitativa por meio do modelo estatístico proposto na seção 3.3. Os erros obtidos da comparação de cada valor numérico e experimental através dos parâmetros da  $MG$  e  $VG$  foram calculados, vale destacar que o erro médio obtido para os parâmetros

analisados são de respectivamente 4,97% e 0,34% portanto está dentro de uma porcentagem aceitável para a validação quantitativa.

Resta a validação para os perfis de velocidade a montante e a jusante do disco de *Mach*. Vários perfis antes e depois da transição abrupta de velocidade foram testados para posterior fins de comparação com o experimento (EGGINS; JACKSON, 1974). Após vários testes o melhor resultado possível aconteceu nas posições de 4,33 mm e 4,8 mm respectivamente para os perfis de velocidade a montante e a jusante do disco de *Mach*, por isso a posição onde acontece a transição denominada disco de Mach ocorre em  $X_{Mach} = 4,565$  mm.

Pela literatura a posição onde a transição ocorre ( $X_{Mach}$ ) é representada pela formulação proposta por *Franquet, et al.* (2015) (FRANQUET et al., 2015) descrita pela Equação 4.1, tem-se que  $d_{lib}$  é o diâmetro de liberação,  $p_{lib}$  e  $p_{amb}$  são respectivamente as pressões de liberação e ambiente.

$$X_{Mach} = 0,645d_{lib}\sqrt{\frac{p_{lib}}{p_{amb}}} \quad (4.1)$$

Utilizando os resultados obtidos pela formulação proposta na Equação 4.1 e o resultado obtido numericamente (pela média das posições dos perfis a montante e a jusante do disco de Mach) foram obtidos os seguintes valores listados na Tabela 4, pode-se observar que os valores tiveram uma defasagem de apenas 2,04%.

Tabela 4 – Erro relativo para a posição do disco de *Mach*.

	Valor $X_{Mach}$ [mm]	Erro [%]
(FRANQUET et al., 2015)	4.4739	0.000
Numérico	4.5650	2.036

Fonte: Elaborado pelo autor.

Com a validação da posição obtida numericamente os respectivos perfis foram comparados para validação qualitativa e quantitativa. As figuras 15 e 16 mostram respectivamente a comparação dos perfis 0,2 mm a montante e a jusante do disco de *Mach*, pode-se observar que os resultados estão bem representados tendo comportamento semelhante aos resultados experimentais. O cálculo do erro para cada valor numérico contra as medições com base nos parâmetros da MG e VG foram realizados para os perfis 0,2 mm a montante e a jusante do disco de *Mach*, os resultados quantitativos foram satisfatórios, pois tiveram erro médio máximo para cada um dos parâmetros nos respectivos perfis de 5,28%, 0,68%, 8,85% e 1,24%.

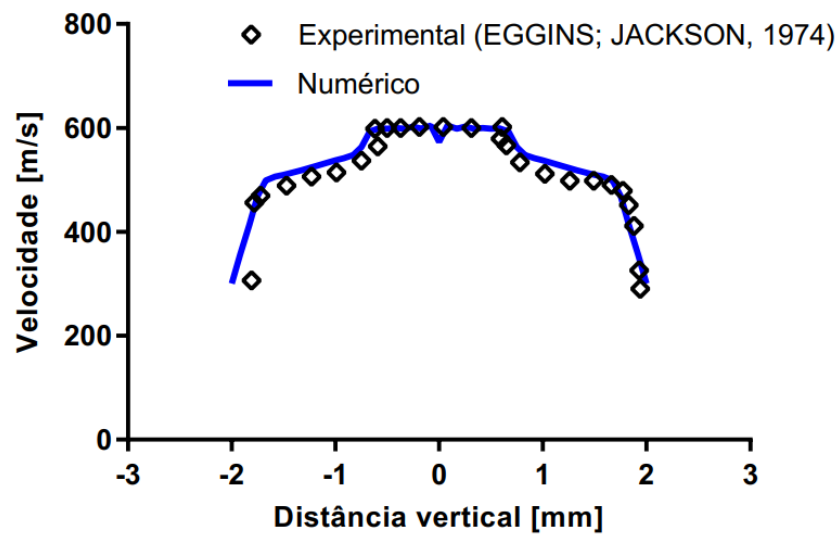


Figura 15 – Perfil de velocidade 0.2 mm a montante do disco de *Mach*

Fonte: Elaborado pelo autor.

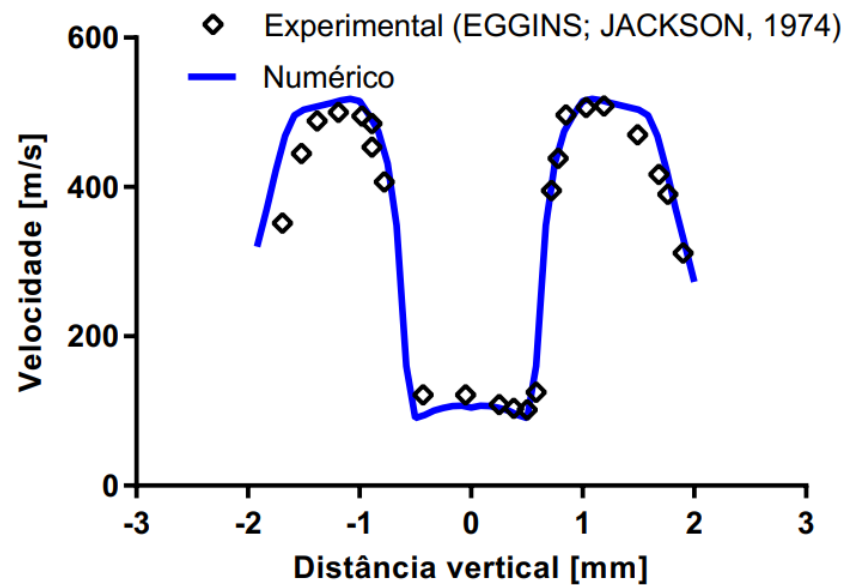


Figura 16 – Perfil de velocidade 0.2 mm a jusante do disco de *Mach*

Fonte: Elaborado pelo autor.

Pode-se observar pelas figuras 15 e 16 que a maior velocidade transversal ocorre no ponto médio em termos de perfil a 0,2 mm a montante do disco de *Mach* e diminui gradualmente depois de aproximadamente 0,5 mm, quanto ao perfil 0,2 mm a jusante, pode-se observar que a velocidade é relativamente baixa na posição intermediária respeitando assim a física do problema com as regiões em forma de barril (TANG et al., 2017) e também a região de transição denominada disco de Mach (ABDELHAMID; DOSANJH, 1969) além das validações qualitativa e quantitativa apresentadas nos parágrafos anteriores.

Por fim observando os contornos de velocidade (Figura 14), pressão (Figura 17) e



temperatura (Figura 18) a estrutura de fluxo consiste em uma região curva, onde o fluxo em expansão é curvado para trás em direção ao eixo por causa do choque com a pressão externa, dessa forma o disco *Mach* totalmente desenvolvido pode ser visto. Percebe-se que alta velocidade gera baixa temperatura devido à conservação de energia. A velocidade é máxima logo um pouco a jusante do bocal, enquanto a temperatura cai drasticamente nesta região. A jusante do disco de *Mach*, a velocidade reduz e a temperatura aumenta de forma correspondente. Após o disco de *Mach* ser percorrido a velocidade aumenta de forma gradativa e a temperatura tende a se estabilizar na temperatura ambiente.

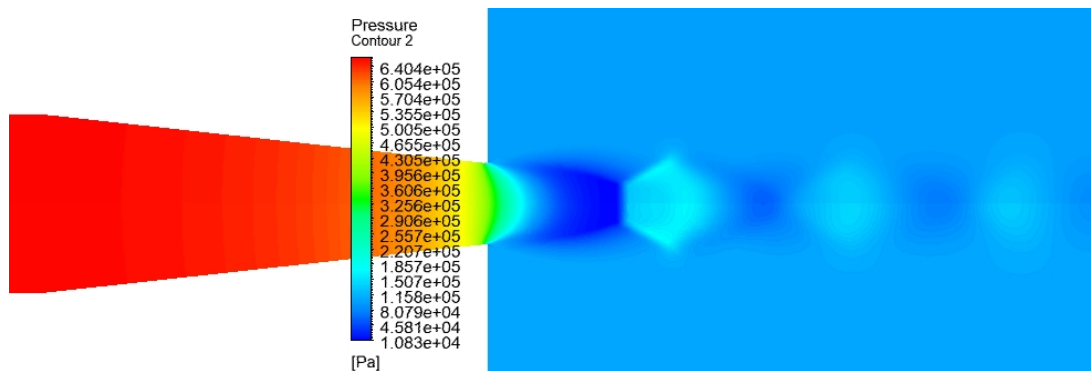


Figura 17 – Contorno de pressão para o fenômeno de expansão.

Fonte: Elaborado pelo autor.

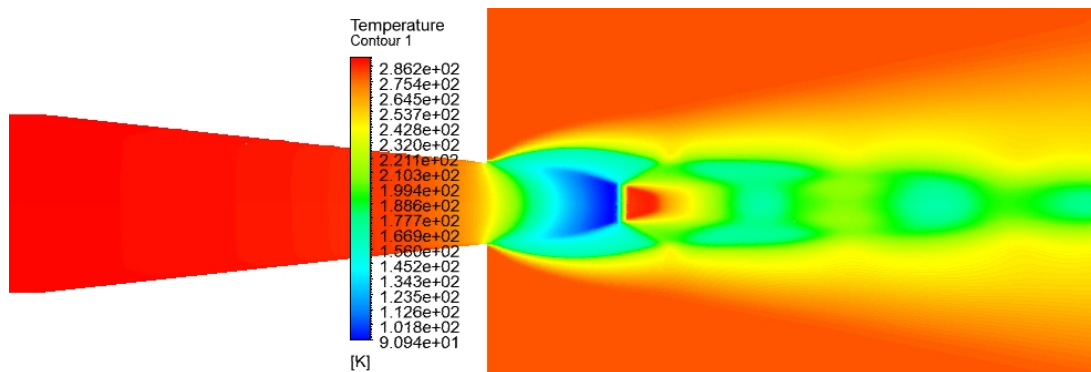


Figura 18 – Contorno de temperatura para o fenômeno de expansão

Fonte: Elaborado pelo autor.

## 5 Modelagem do Fenômeno de Dispersão

Um modelo CFD foi proposto para simular a dispersão em um ambiente, tendo como base de comparação o experimento de *Davies e Singh* (DAVIES; SINGH, 1985) que teve como princípio uma série de liberações quase instantâneas de misturas de freon-nitrogênio à temperatura ambiente sendo realizado em *Thorney Island*. Os testes foram concebidos para estudar a dispersão de nuvens de gás inflamáveis, densas e instantaneamente formadas, que podem resultar de libertações catastróficas. Eles foram realizados em resposta às recomendações do Comitê Consultivo sobre Riscos Graves do Reino Unido, que foi nomeado após a desastrosa explosão de nuvem de vapor não confinado em *Flixborough*, Reino Unido, em 1º de junho de 1974.

Um dos objetivos do projeto foi estudar a dispersão de gases em torno de obstáculos. Nos ensaios com o edifício isolado, o obstáculo foi um cubo de  $9\text{ m} \times 9\text{ m} \times 9\text{ m}$  feito de folhas de plástico fixadas a uma moldura de madeira. A fonte de gás era uma tenda cilíndrica de 14 m de diâmetro, 13 m de altura e capacidade de volume total de cerca de  $2000\text{ m}^3$ , feita de material flexível, que era deixada desabar ao solo no início de cada tentativa como pode ser mostrado pela [Figura 19](#).

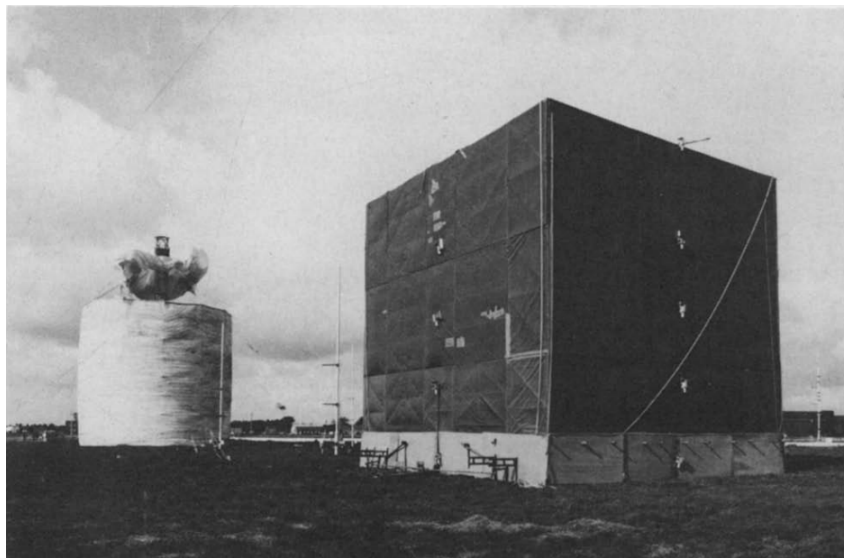


Figura 19 – Vista do obstáculo cúbico a jusante da fonte cilíndrica.

Fonte: (DAVIES; SINGH, 1985).

No ensaio nº 26, o obstáculo estava situado a 50 m a favor do vento da tenda de gás cilíndrica, o gás liberado era uma mistura de 68,4% de nitrogênio ( $N_2$ ) e 31,6% de Freon 12 ( $CCl_2F_2$ ). Durante a execução do teste, a velocidade do vento foi relativamente baixa ( $1,9\text{ m/s}$ ). As medições de concentração foram registradas na parte frontal e posterior

do obstáculo. O experimento pode simular uma área urbana com edifícios de maneira simplificada, tendo como objetivo a validação do perfil de concentração do gás de estudo.

Das considerações importantes levantadas da literatura para a correta modelagem do fenômeno de dispersão pode-se destacar as seguintes:

- Os modelos de turbulência  $k-\varepsilon$  e  $k-\omega$  SST descrevem bem o fenômeno de dispersão bem como a correta modelagem do nível de turbulência associado (LABOVSKÝ et al., 2011; TAUSEEF; RASHTCHIAN; ABBASI, 2011);
- A concentração do gás de estudo tende a aumentar com a redução da velocidade média do vento e aumento da temperatura ambiente (MOCELLIN; VIANELLO; MASCHIO, 2015);
- A presença de edifícios reduz a concentração máxima e aumenta a propagação lateral da nuvem. A dinâmica de dispersão também é afetada pela quantidade de gás pesado liberado (MCBRIDE et al., 2001; SCARGIALI et al., 2011; HSIEH; LIEN; YEE, 2013);

O gás liberado pode se dispersar a favor do vento, afetando potencialmente os seres vivos e o meio ambiente. Portanto, obter um entendimento da dispersão do gás liberado de dutos é essencial para posteriores avaliações de segurança. As posteriores seções destacam todo o procedimento para a validação do modelo numérico proposto.

## 5.1 Geometria e malha

O domínio computacional foi definido como tridimensional estando de acordo com a configuração do experimento de fase II de *Thorney Island Trial* 26. Conforme mostrado na Figura 20, o domínio teve como dimensões 300 m de comprimento (eixo X), 260 m de largura (eixo Y) e 80 m de altura (eixo Z), as medidas foram estipuladas dessa forma para que as paredes não afetassem os cálculos. A malha computacional consistiu em 279.511 elementos, com refinamento em torno das superfícies do cilindro, do edifício (obstáculo) e próximo ao solo (consulte a Figura 21).

Foram definidas nove condições de contorno, sendo elas:

- (1) Entrada do vento; (2) Solo; (3) Superfície do edifício; (4) Lado esquerdo; (5) Lado direito; (6) Topo; (7) Saída; (8) Topo do cilindro; (9) Laterais do cilindro;

Para a região (1) foi utilizada a velocidade uniforme do vento de 1,9 m/s com temperatura e pressão ambiente de 298,15 K e 0 Pa (absoluto). A região (2) foi definida como uma parede com altura de rugosidade igual a 0,1 m. As regiões (4,5,6) foram definidas

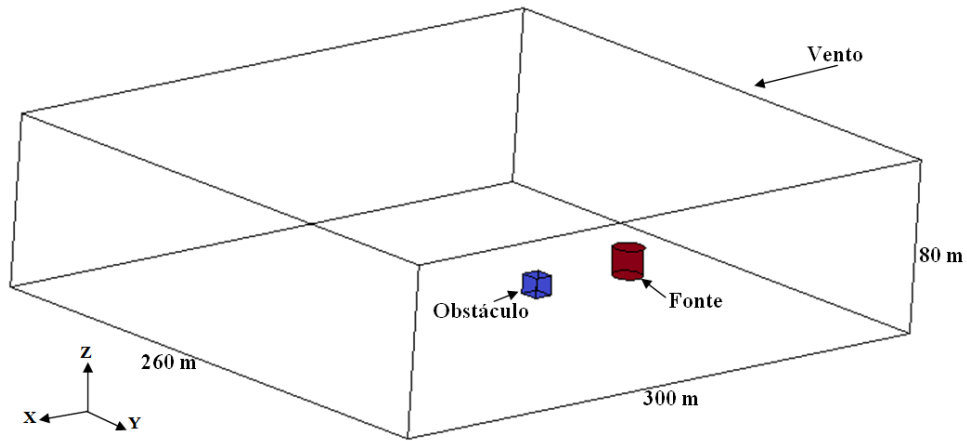


Figura 20 – Esquema do domínio computacional para o modelo de dispersão.

Fonte: Elaborado pelo autor.

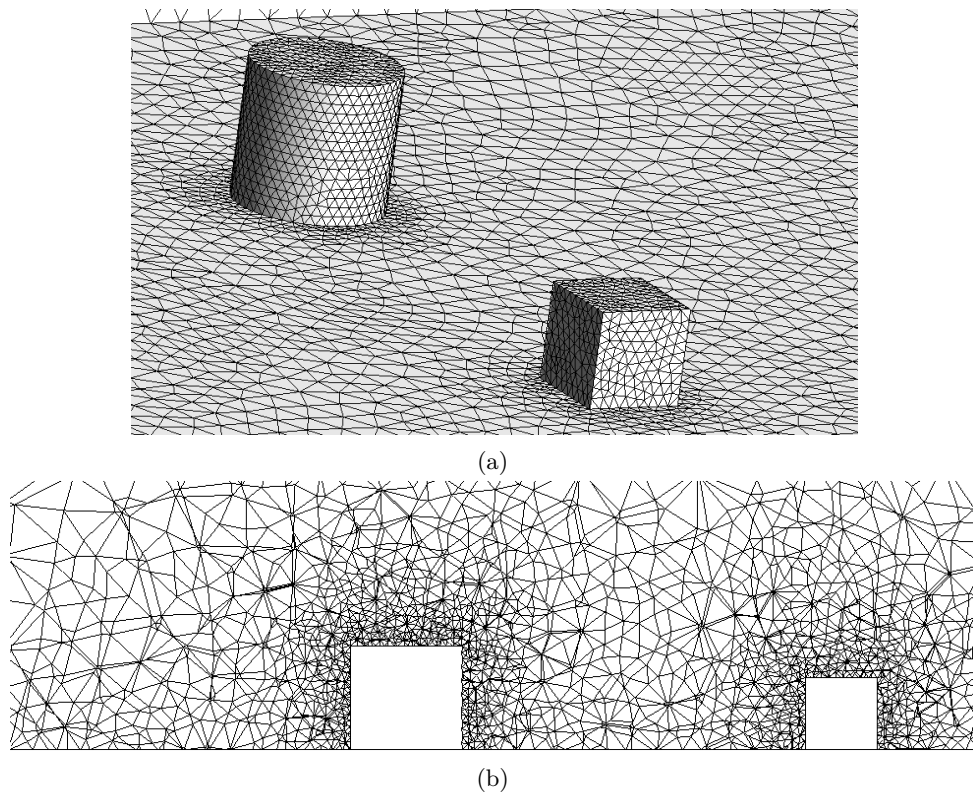


Figura 21 – (a) Detalhamento da Malha próxima a fonte e obstáculo 3D e (b) 2D

Fonte: Elaborado pelo autor.

como regiões de gradientes de pressão iguais a zero permitindo que o escoamento apenas deslize sobre essas regiões. Para a região (7) foi utilizada pressão e temperatura ambiente (0 Pa (manométrica) e 298,15 K), por fim as regiões (3,8,9) foram definidas como parede com altura de rugosidade igual a zero.

Para imitar a rápida liberação da fonte poluente, inicialmente as laterais do cilindro (9) foram configuradas como uma parede antiderrapante e a condição inicial do campo de

velocidade para o vento foi obtido por meio de uma simulação em regime permanente. Em seguida, o modelo transiente foi utilizado e a superfície do cilindro foi configurada como uma região com entrada de fluxo de massa, tendo vazão igual a 3178 Kg/s com duração de 3 s a temperatura de 278,15 K, além disso, as frações molares foram definidas com 0,684 de  $N_2$  e 0,316 de  $CCL_2F_2$ , após o tempo de 3 s ser percorrido, novamente a região (9) foi configurada como uma região de parede antiderrapante até completar o tempo total de simulação com 250 s.

## 5.2 Equacionamento

No modelo em questão foram utilizadas as equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e espécies para escoamento tridimensional, o modelo de turbulência utilizado foi o  $k - \omega$  SST com nível de turbulência obtido a partir do equacionamento de diâmetro hidráulico, além disso o mesmo termo fonte na equação de quantidade de movimento foi utilizado para quantificar os efeitos do empuxo e a mistura foi modelada como um fluido incompressível como já foi discutido anteriormente.

A equação de conservação de massa para um escoamento tridimensional é dada pela [Equação 5.1](#):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i) = 0 \quad (5.1)$$

tem-se que  $\rho$  é a massa específica do fluido,  $t$  o tempo,  $v_i$  a componente de velocidade ao longo da respectiva direção  $x_i$ .

A equação de conservação da quantidade de movimento (equações de *Navier-Stokes* com média de *Reynolds*) é descrita pela [Equação 5.2](#):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i v_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( v \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \overline{\rho v_i' v_j'} \right) \quad (5.2)$$

onde  $p$  é a pressão.

A equação de conservação de energia é mostrada pela [Equação 5.3](#):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot [\vec{v}(\rho E + p)] = \nabla \cdot \left( k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + \overline{\tau}_{eff} \cdot \vec{v} \right) + S_h \quad (5.3)$$

onde  $S_{rad}$  é o termo fonte de calor por radiação,  $k_{eff}$  condutividade térmica efetiva e a energia  $E$  é dada pela [Equação 5.4](#):

$$E = h - \frac{P}{\rho} + \frac{|\tilde{v}^2|}{2} \quad (5.4)$$

onde  $h$  é a entalpia.

A equação de conservação de espécies é dada pela [Equação 3.8](#) já mencionada no [Capítulo 3](#) e que foi utilizada também neste capítulo:

O modelo de turbulência utilizado no modelo proposto foi o  $k - \omega$  SST tendo como formulação a [Equação 5.5](#) e [Equação 5.6](#)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k v_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + \tilde{G}_k - Y_k \quad (5.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \omega v_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + G_\omega - Y_\omega \quad (5.6)$$

onde  $G_k$  representa a geração de energia cinética turbulenta devido a gradientes médios de velocidade,  $G_\omega$  representa a geração de  $\omega$ .  $\Gamma_k$  e  $\Gamma_\omega$  representam a difusividade efetiva de  $k$  e  $\omega$  respectivamente.  $Y_k$  e  $Y_\omega$  representam a dissipação de  $k$  e  $\omega$  devido à turbulência. Todos os termos acima são calculados conforme descrito abaixo.

As difusividades efetivas para o modelo  $k - \omega$  são dadas por:

$$\begin{aligned} \Gamma_k &= \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \\ \Gamma_\omega &= \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \end{aligned} \quad (5.7)$$

onde  $\sigma_k$  e  $\sigma_\omega$  são os números turbulentos de Prandtl para  $k$  e  $\omega$ , respectivamente. A viscosidade turbulenta,  $\mu_t$ , é calculada combinando  $k$  e  $\omega$  da seguinte forma:

$$\mu_t = \alpha^* \frac{\rho k}{\omega} \quad (5.8)$$

O termo  $G_k$  representa a produção de energia cinética turbulenta decorrente da equação de transporte  $k$ , esse termo pode ser definido como:

$$G_k = -\overline{\rho v'_i v'_j} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \quad (5.9)$$

O termo  $G_\omega$  é dado por:

$$G_\omega = \alpha \frac{\omega}{k} G_k \quad (5.10)$$

o coeficiente  $\alpha$  na [Equação 5.10](#) é descrito por:

$$\alpha = \frac{\alpha_\infty}{\alpha^*} \left( \frac{\alpha_0 + \text{Re}_t / R_\omega}{1 + \text{Re}_t / R_\omega} \right) \quad (5.11)$$

O termo da dissipação devido a  $k$ ,  $Y_k$  é dado por:

$$Y_k = \rho \beta^* f_{\beta^*} k \omega \quad (5.12)$$

onde:

$$f_{\beta^*} = \begin{cases} 1 & \chi_k \leq 0 \\ \frac{1+680\chi_k^2}{1+400\chi_k^2} & \chi_k > 0 \end{cases}$$

$$\chi_k \equiv \frac{1}{\omega^3} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (5.13)$$

$$\beta^* = \beta_i^* [1 + \zeta^* F(M_t)]$$

$$\beta_i^* = \beta_\infty^* \left( \frac{4/15 + (\text{Re}_t / R_\beta)^4}{1 + (\text{Re}_t / R_\beta)^4} \right)$$

O termo da dissipação devido a  $\omega$ ,  $Y_\omega$  é dado por:

$$Y_\omega = \rho \beta f_\beta \omega^2 \quad (5.14)$$

onde:

$$f_\beta = \frac{1 + 70\chi_\omega}{1 + 80\chi_\omega}$$

$$\chi_\omega = \left| \frac{\Omega_{ij} \Omega_{jk} S_{ki}}{(\beta_\infty^* \omega)^3} \right| \quad (5.15)$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$$

As constantes para o modelo de turbulência  $k - \omega$  são as seguintes:

$$\alpha_{\infty}^* = 1, \quad \alpha_{\infty} = 0.52, \quad \alpha_0 = \frac{1}{9}, \quad \beta_{\infty}^* = 0.09, \quad \beta_i = 0.072, \quad R_{\beta} = 8 \quad (5.16)$$

$$R_k = 6, \quad R_{\omega} = 2.95, \quad \zeta^* = 1.5, \quad M_{t0} = 0.25, \quad \sigma_k = 2.0, \quad \sigma_{\omega} = 2.0$$

Para descrever o nível de turbulência o equacionamento para o diâmetro hidráulico ( $D_h$ ) foi utilizado, tendo como equacionamento padrão o seguinte:

$$D_h = \frac{4A_{ent}}{P_{ent}} \quad (5.17)$$

onde  $A_{ent}$  é a área da região escolhida como entrada de vento e  $P_{ent}$  é o perímetro desta respectiva área.

Por fim o método estatístico (seção 3.3), modelo de conservação de espécies (Equação 3.8) e o termo fonte utilizado para quantificar os efeitos do empuxo (Equação 3.16) também estão presentes neste modelo:

### 5.3 Métodos de Solução

Os métodos de solução foram escolhidos visando obter a melhor convergência possível, várias simulações foram feitas para obter convergência com resíduo  $10^{-4}$ . O modelo proposto foi dividido em três etapas como citado anteriormente, ou seja, primeiro uma simulação em regime permanente foi realizada obtendo o perfil do vento com 2000 iterações, em seguida o regime passou para transiente com a liberação do gás durante 3 s nas laterais da fonte cilíndrica utilizando um tamanho do passo de tempo de 0,05 s, portanto 60 passos de tempo com 30 iterações a cada passo de tempo, por fim a terceira etapa considerou novamente a fonte como parede para completar os 250 s da simulação com um tamanho do passo de tempo de 0,5 s, portanto 494 passos de tempo com 30 iterações a cada passo de tempo. Um resumo de todos os métodos de solução utilizados nas simulações são descritos pela Tabela 5.

### 5.4 Resultados

Após todo o procedimento realizado anteriormente, um caso de estado estacionário foi inicialmente resolvido para obter os valores iniciais para a simulação transitória. O critério de convergência foi definido como o resíduo tornando-se igual ou menor que  $10^{-4}$ . A Figura 22 mostra o contorno da velocidade do vento resolvida no plano médio do domínio. O perfil da velocidade do vento na entrada e o efeito de bloqueio do edifício e do cilindro de gás inicial foram bem refletidos.



Tabela 5 – Métodos de solução para o modelo de dispersão.

Acoplamento pressão-velocidade		Coupled
	Gradientes	<i>Least Squares Cell Based</i>
	Pressão	Segunda ordem
	Momentum	Segunda ordem <i>upwind</i>
	Energia cinética turbulenta	Segunda ordem <i>upwind</i>
Discretização espacial	Taxa de Dissipação Específica	Segunda ordem <i>upwind</i>
	$N_2$	Segunda ordem <i>upwind</i>
	$CCL_2F_2$	Segunda ordem <i>upwind</i>
	Energia	Segunda ordem <i>upwind</i>

Fonte: Elaborado pelo autor.

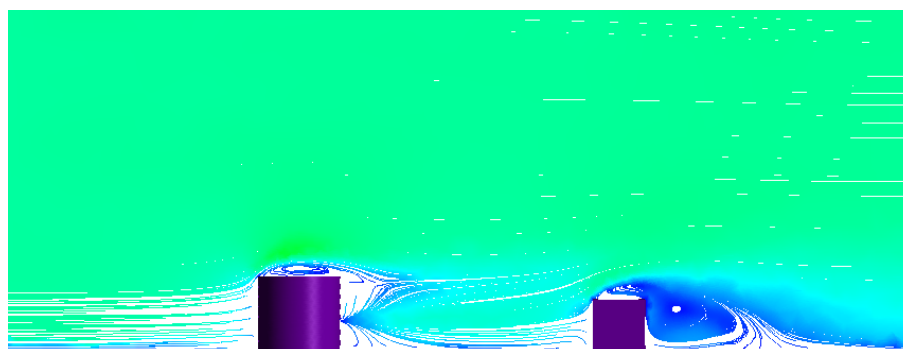


Figura 22 – Padrão de fluxo de estado estacionário no plano médio (Velocidade).

Fonte: Elaborado pelo autor.

Conforme mostrado na [Figura 22](#), os padrões de recirculação do fluxo ao redor do cilindro e do edifício foram bem capturados, a formação dos vórtices afeta a dispersão inicial do poluente e também atrás do edifício “prendendo” o poluente durante mais tempo se comparado na frente.

O experimento de comparação ([DAVIES; SINGH, 1985](#)) contou com dois sensores de concentração montados nas faces do edifício. Um está a barlavento (frente) a uma altura de 6,4 m e outro está a sotavento (atrás) a uma altura de 0,4 m. Para as validações qualitativa e quantitativa foram comparados os níveis de concentração de Freon 12 ( $CCL_2F_2$ ) nas mesmas posições indicadas no experimento. As figuras [23](#) e [24](#) mostram uma comparação entre os históricos de tempo de concentração de Freon 12 ( $CCL_2F_2$ ) medidos e previstos para as faces de barlavento e sotavento, respectivamente. O modelo proposto está de acordo com os resultados experimentais, obtendo resultados bem semelhantes, além disso, o erro médio máximo obtido dos parâmetros da MG e VG nas faces de barlavento e sotavento foram respectivamente de 6,02% e 6,86%, validando assim o modelo proposto para o fenômeno de dispersão.

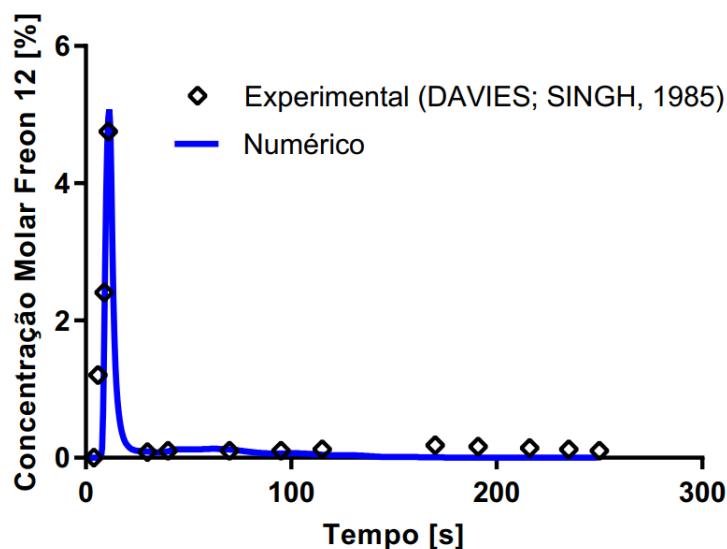


Figura 23 – Evolução da concentração molar de Freon 12 a 6,4 m de elevação no lado de barlavento do obstáculo - simulação vs numérico.

Fonte: Elaborado pelo autor.

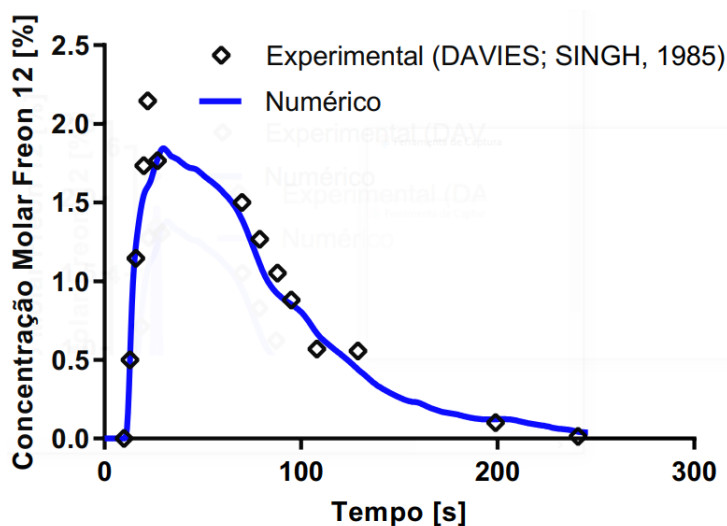


Figura 24 – Evolução da concentração molar de Freon 12 a 0,4 m no lado de sotavento do obstáculo - simulação vs numérico.

Fonte: Elaborado pelo autor.

As histórias de tempo de concentração observadas nas faces de barlavento e sotavento do obstáculo cúbico são bastante diferentes. Observe que a persistência da nuvem de gás observada na face a sotavento do obstáculo cúbico é significativamente maior do que a observada na face a barlavento. Isso demonstra o efeito do obstáculo na dispersão, onde a recirculação na região da esteira do obstáculo aprisiona o material contaminante da nuvem de gás. O aprisionamento do poluente na esteira do obstáculo é corretamente previsto pelo modelo, assim como a mudança nas concentrações nas faces frontal e traseira do edifício com desvios dentro do permitido segundo o método estatístico proposto.

A [Figura 25](#) mostra o padrão de dispersão (a)3 s, (b)6 s, (c)12 s, (d)24 s, (e)48 s e (f)96 s após a liberação, respectivamente. A nuvem de gás altamente concentrada exibe um forte movimento de massa para baixo. Observe que inicialmente as forças geradas pela flutuabilidade e gradientes de pressão decorrentes das diferenças de massa específica entre a nuvem de gás e seu ambiente levam a um movimento em massa que faz com que a nuvem densa se espalhe em todas as direções próximas ao local de liberação. Mais a jusante da liberação, o fluxo em massa resultante da queda gravitacional enfraquece à medida que a difusão, mistura e arrastamento entre a nuvem de gás e o ar ambiente reduz, fortalecendo a influência do campo de velocidade imposto externamente sobre o transporte e dispersão da nuvem. Observa-se que a densa nuvem de gás flui ao redor do obstáculo cúbico localizado a favor do vento da liberação. O obstáculo cúbico pode bloquear a propagação ainda mais a favor do vento da densa nuvem de gás, fazendo com que a concentração do poluente demore a se desprender na parte de trás do obstáculo aumentando assim o risco de acidentes envolvendo gases pressurizados na presença de obstáculos a favor do vento.

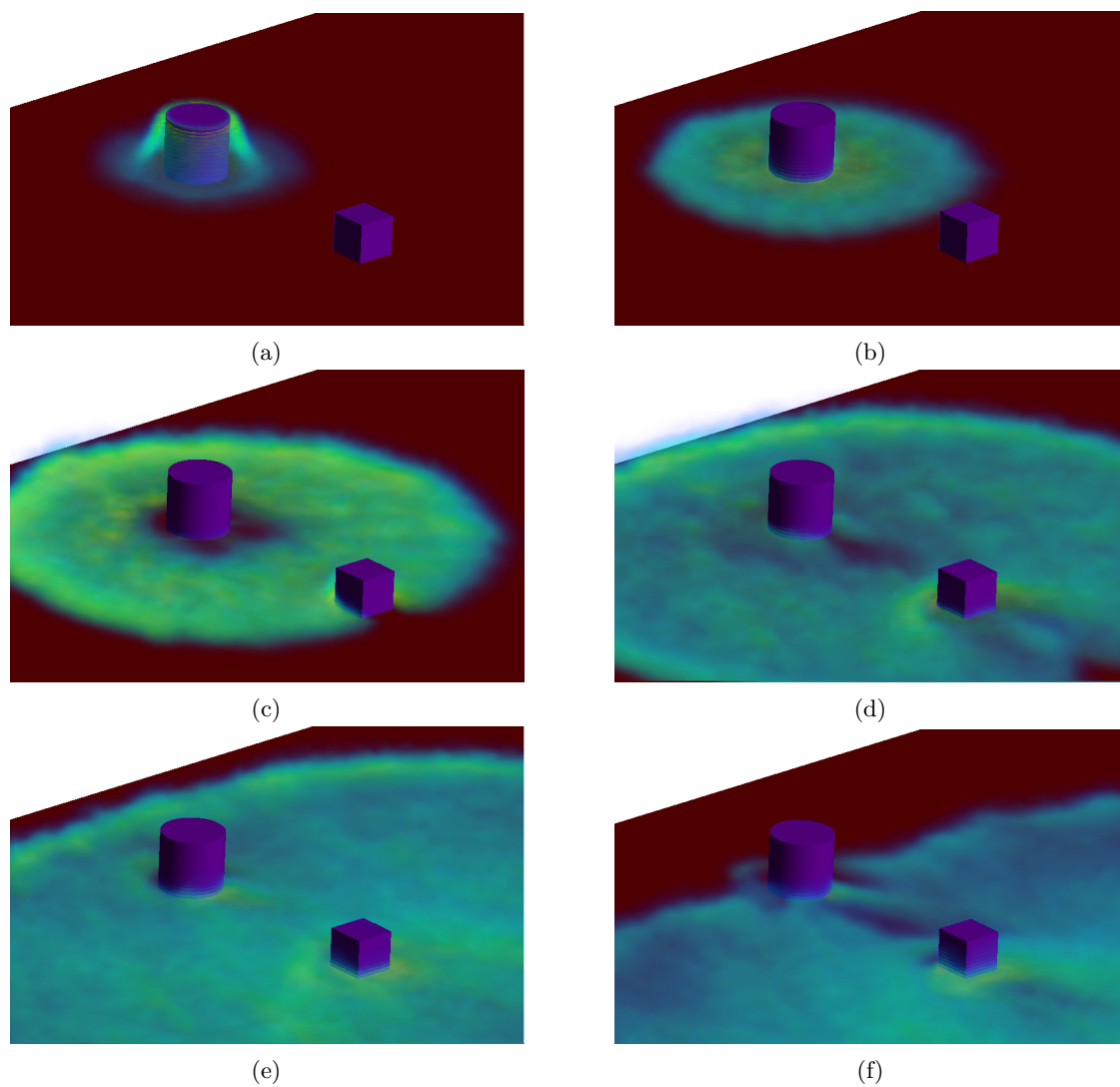


Figura 25 – Evolução da fração molar de Freon 12 durante o tempo.

Fonte: Elaborado pelo autor.

## 6 Conclusões e perspectivas futuras

Foram propostos três modelos numéricos que tiveram como princípio a validação dos fenômenos de depressurização, expansão e dispersão que são provenientes de vazamentos de gases pressurizados em tubulações. Verificou-se que os resultados obtidos pelos modelos concordam bem com as medições dos experimentos de Botros et al. (BOTROS et al., 2004), Eggins e Jackson (EGGINS; JACKSON, 1974) e Davies e Singh (DAVIES; SINGH, 1985). Para os três modelos além da validação qualitativa, a validação quantitativa também foi realizada utilizando o método estatístico proposto por Hanna et al. (HANNA; CHANG; STRIMAITIS, 1993), dessa forma foi obtida uma porcentagem para os parâmetros da MG e VG de cada modelo proposto, obtendo um resultado satisfatório para todos eles. Como contribuições para os modelos validados destaca-se a utilização da UDF para contabilizar os efeitos do empuxo em virtude da mudança de massa específica provocada pela equação de gás real de *Peng-Robinson*, além do uso da ferramenta *patch* presente no *Fluent* para aplicação nos elementos da malha as condições de estagnação da tubulação e ambiente delimitando corretamente essas regiões para a melhor representação da física do problema, além da otimização da malha no modelo de expansão com o uso da malha adaptativa em relação aos gradientes de velocidade e pressão, por fim os modelos numéricos validados, servem como uma ótima ferramenta para auxiliar empresas e indústrias a prever quais serão as principais consequências decorrentes do vazamento de gases pressurizados através de uma aplicação de interesse.

Para o fenômeno de depressurização o experimento (BOTROS et al., 2004) foi utilizado para validação numérica e foi obtido resultados condizentes com os experimentais, o erro médio máximo obtido para os Parâmetros da MG e VG foi de 8,88% para a descompressão no sensor P1 que estava localizado a 0,399 m da saída da tubulação e de 5,91% para o sensor P8 que estava localizado a 1,149 m. Como contribuições para o modelo proposto, foi obtida as principais regiões do modelo de expansão, em virtude da realização de um domínio que representou a saída da tubulação para a atmosfera, além da pressão de saída da tubulação que teve como resultado após sua liberação de 10,41 MPa em aproximadamente 5 MPa, obtendo então resultados importantes para servir como dados de entrada para a parte de expansão.

O modelo de expansão teve resultados satisfatórios que foram comparados com o experimento (EGGINS; JACKSON, 1974), foram obtidas as principais regiões deste fenômeno que são, as regiões de choque em forma de barril onde  $Mach \gg 1$  (TANG et al., 2017) e também a região de limite de transição chamada de “disco de Mach” (ABDELHAMID; DOSANJH, 1969) respeitando assim a física do problema, mostrando também que em decorrência do vazamento de gases pressurizados, toda energia acumulada

na forma de pressão e temperatura tende a se transformar em velocidade, alcançado valores superiores a 600 m/s, além disso, o modelo foi validado comparado com os dados experimentais (EGGINS; JACKSON, 1974), primeiro com o perfil de velocidade logo após a saída do bico convergente o erro médio máximo obtido para os parâmetros estatísticos da MG e VG de 4,97% e 0,34%, após esta validação os perfis de velocidade vertical 0,2 mm a montante e a jusante do disco de Mach foram também validados com erros médios máximo respectivamente iguais para a MG e VG de 5,28% e 0,68%, 8,85% e 1,24%, além disso, a posição em que ocorre a formação do disco de Mach obtida em 4,5650 mm também foi validada comparada a formulação proposta por Franquet, et al. (FRANQUET et al., 2015), foi obtido um erro entre os valores de apenas 2,04%, mostrando que o modelo numérico proposto é uma ótima ferramenta para alimentar os dados de entrada para a parte posterior de dispersão de gases.

Por fim o modelo de dispersão teve como base de comparação o experimento (DAVIES; SINGH, 1985) e foi validado, obtendo erro médio máximo para os parâmetros da MG e VG de 6,02% e 6,86% para o campo de concentração do gás poluente a 6,4 m de elevação na parte de barlavento do obstáculo e 0,4 m de elevação a sotavento do obstáculo. O modelo pode prever a influência de um obstáculo localizado a 50 m da fonte de vazamento, foi obtido o perfil do vento que mostra que a presença de obstáculos formam vórtices que aprisionam o gás poluente atrás dele por mais tempo e aumentam a dispersão lateral do gás, dessa forma o modelo serve como base por exemplo para apontar os pontos críticos de uma dispersão de gases em um ambiente industrial, além do alcance máximo do mesmo dentro do domínio de estudo. Dessa forma os modelos validados servem de base para apontar por exemplo quais as principais consequências decorrentes em um vazamento de gases pressurizados em tubulações em uma aplicação industrial.

Como projeções futuras, pode-se destacar que os modelos propostos trabalharam com o vazamento de gases somente na fase gasosa, os mesmos tiveram resultados satisfatórios, mais nada impede a aplicação de outros para melhorá-los, como a aplicação de modelos multifásicos, outros modelos de turbulência, equações de estado, além da otimização do termo fonte utilizado para efeitos do empuxo podem representar uma melhora ainda maior para os modelos propostos, além disso, a aplicação em outros experimentos presentes na literatura é outro indicativo para mostrar se os modelos propostos apresentados servem para uma gama maior de experimentos. Desta forma poderá ser criada uma forte ferramenta para auxiliar as empresas e indústrias que trabalham com gasodutos a conhecerem quais as principais consequências decorrentes deste tipo de vazamento e formularem com mais precisão planos de contingência para os acidentes.

# Referências

ABDELHAMID, A.; DOSANJH, D. Mach disc and Riemann wave in underexpanded jet flows. In: *2nd Fluid and Plasma Dynamics Conference*. [S.l.: s.n.], 1969. p. 665. Citado 6 vezes nas páginas [17](#), [31](#), [33](#), [37](#), [39](#) e [52](#).

(ABNT). *ABNT (Associação Brasileira de Normas Técnicas) NBR ISO/IEC 31010 2012 Gestão de Riscos - Técnicas para o processo de avaliação de riscos*. Rio de Janeiro, RJ: ABNT, 2009. Citado na página [13](#).

ANSYS. *ANSYS Fluent - User's Theory Guide*. [S.l.]: Ansys, 2016. Citado 2 vezes nas páginas [25](#) e [35](#).

BILICKI, Z.; KESTIN, J. Physical aspects of the relaxation model in two-phase flow. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, v. 428, n. 1875, p. 379–397, 1990. Publisher: The Royal Society London. Citado na página [20](#).

BIRCH, A.; HUGHES, D.; SWAFFIELD, F. Velocity decay of high pressure jets. *Combustion science and technology*, Taylor & Francis, v. 52, n. 1-3, p. 161–171, 1987. Citado na página [18](#).

BOTROS, K.; GEERLIGS, J.; EIBER, R. Measurement of decompression wave speed in rich gas mixtures at high pressures (370 bars) using a specialized rupture tube. *Journal of Pressure Vessel Technology*, v. 132, n. 5, 2010. Publisher: American Society of Mechanical Engineers Digital Collection. Citado na página [21](#).

BOTROS, K. et al. Effects of pipe internal surface roughness on decompression wave speed in natural gas mixtures. In: *International Pipeline Conference*. [S.l.: s.n.], 2010. v. 44212, p. 907–922. Citado 2 vezes nas páginas [16](#) e [17](#).

BOTROS, K. et al. Transferability of decompression wave speed measured by a small-diameter shock tube to full size pipelines and implications for determining required fracture propagation resistance. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, Elsevier, v. 87, n. 12, p. 681–695, 2010. Citado na página [17](#).

BOTROS, K. K. et al. Determination of decompression wave speed in rich gas mixtures. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Wiley Online Library, v. 82, n. 5, p. 880–891, 2004. Citado 6 vezes nas páginas [5](#), [7](#), [16](#), [22](#), [23](#) e [52](#).

BROWN, S. et al. A homogeneous relaxation flow model for the full bore rupture of dense phase CO<sub>2</sub> pipelines. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Elsevier, v. 17, p. 349–356, 2013. Citado na página [22](#).

CHORIN, A. J. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Mathematics of computation*, v. 22, n. 104, p. 745–762, 1968. Citado na página [36](#).

CHUECH, S.; LAI, M.-C.; FAETH, G. M. Structure of turbulent sonic underexpanded free jets. *AIAA journal*, v. 27, n. 5, p. 549–559, 1989. Citado na página [20](#).

- COSHAM, A.; EIBER, R. J.; CLARK, E. B. GASDECOM: Carbon dioxide and other components. In: *International Pipeline Conference*. [S.l.: s.n.], 2010. v. 44212, p. 777–794. Citado 2 vezes nas páginas [18](#) e [27](#).
- COSHAM, A. et al. Ruptures in gas pipelines, liquid pipelines and dense phase carbon dioxide pipelines. In: AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS. *International Pipeline Conference*. [S.l.], 2012. v. 45141, p. 465–482. Citado na página [22](#).
- DAVIES, M.; SINGH, S. The phase ii trials: a data set on the effect of obstructions. *Journal of Hazardous Materials*, Elsevier, v. 11, p. 301–323, 1985. Citado 5 vezes nas páginas [21](#), [41](#), [48](#), [52](#) e [53](#).
- DENG, Y. et al. A method for simulating the release of natural gas from the rupture of high-pressure pipelines in any terrain. *Journal of Hazardous Materials*, Elsevier, v. 342, p. 418–428, 2018. Citado na página [14](#).
- DRESCHER, M. et al. Experiments and modelling of two-phase transient flow during pipeline depressurization of co2 with various n2 compositions. *Energy Procedia*, Elsevier, v. 63, p. 2448–2457, 2014. Citado na página [16](#).
- EGGINS, P.; JACKSON, D. Laser-Doppler velocity measurements in an under-expanded free jet. *Journal of Physics D: Applied Physics*, v. 7, n. 14, p. 1894, 1974. Publisher: IOP Publishing. Citado 6 vezes nas páginas [21](#), [33](#), [35](#), [38](#), [52](#) e [53](#).
- ERBRINK, J. A practical model for the calculation of  $\sigma_y$  and  $\sigma_z$  for use in an on-line gaussian dispersion model for tall stacks, based on wind fluctuations. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, Elsevier, v. 25, n. 2, p. 277–283, 1991. Citado na página [19](#).
- FEARNEHOUGH, G. Fracture propagation control in gas pipelines: a survey of relevant studies. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, Elsevier, v. 2, n. 4, p. 257–282, 1974. Citado na página [16](#).
- FRANQUET, E. et al. Free underexpanded jets in a quiescent medium: A review. *Progress in Aerospace Sciences*, v. 77, p. 25–53, 2015. Publisher: Elsevier. Citado 3 vezes nas páginas [17](#), [38](#) e [53](#).
- GROVES, T.; BISHNOI, P.; WALLBRIDGE, J. Decompression wave velocities in natural gases in pipe lines. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Wiley Online Library, v. 56, n. 6, p. 664–668, 1978. Citado na página [16](#).
- HANNA, S. R.; BRITTER, R.; FRANZESE, P. A baseline urban dispersion model evaluated with salt lake city and los angeles tracer data. *Atmospheric Environment*, Elsevier, v. 37, n. 36, p. 5069–5082, 2003. Citado na página [19](#).
- HANNA, S. R.; CHANG, J.; STRIMAITIS, D. Hazardous gas model evaluation with field observations. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, v. 27, n. 15, p. 2265–2285, 1993. Publisher: Elsevier. Citado 3 vezes nas páginas [28](#), [29](#) e [52](#).
- HORVATH, A. Redlich-kwong equation of state: review for chemical engineering calculations. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 29, n. 5, p. 1334–1340, 1974. Citado na página [19](#).



- HSIEH, K.-J.; LIEN, F.-S.; YEE, E. Dense gas dispersion modeling of CO<sub>2</sub> released from carbon capture and storage infrastructure into a complex environment. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Elsevier, v. 17, p. 127–139, 2013. Citado na página 42.
- INSTITUTE, E. *Technical guidance on hazard analysis for onshore carbon capture installations and onshore pipelines*. [S.l.]: Energy Institute, 2010. Citado na página 14.
- KLING, G. W. et al. The 1986 lake Nyos gas disaster in Cameroon, West Africa. *Science*, v. 236, n. 4798, p. 169–175, 1987. Publisher: American Association for the Advancement of Science. Citado na página 13.
- KOORNNEEF, J. et al. Quantitative risk assessment of CO<sub>2</sub> transport by pipelines—a review of uncertainties and their impacts. *Journal of Hazardous Materials*, v. 177, n. 1-3, p. 12–27, 2010. Publisher: Elsevier. Citado na página 13.
- KUNZ, O. et al. The GERG-2004 wide-range equation of state for natural gases and other mixtures. 2007. Citado 3 vezes nas páginas 18, 27 e 29.
- LABOVSKÝ, J.; JELEMENSKÝ, L. CFD simulations of ammonia dispersion using “dynamic” boundary conditions. *Process Safety and Environmental Protection*, Elsevier, v. 88, n. 4, p. 243–252, 2010. Citado na página 19.
- LABOVSKÝ, J. et al. Verification of CFD pollution dispersion modelling based on experimental data. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, Elsevier, v. 24, n. 2, p. 166–177, 2011. Citado na página 42.
- LANKADASU, A. et al. Numerical modeling of supercritical CO<sub>2</sub> leaks and its subsequent dispersion in the ambient air. *Procedia IUTAM*, Elsevier, v. 15, p. 49–56, 2015. Citado na página 14.
- LI, H. et al. PVTxy properties of CO<sub>2</sub> mixtures relevant for CO<sub>2</sub> capture, transport and storage: Review of available experimental data and theoretical models. *Applied Energy*, v. 88, n. 11, p. 3567–3579, 2011. Publisher: Elsevier. Citado na página 21.
- LI, H.; YAN, J. Evaluating cubic equations of state for calculation of vapor–liquid equilibrium of CO<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub>-mixtures for CO<sub>2</sub> capture and storage processes. *Applied Energy*, v. 86, n. 6, p. 826–836, 2009. Publisher: Elsevier. Citado na página 21.
- LI, K. et al. An experimental investigation of supercritical CO<sub>2</sub> accidental release from a pressurized pipeline. *The Journal of Supercritical Fluids*, v. 107, p. 298–306, 2016. Publisher: Elsevier. Citado na página 13.
- LIU, B. et al. A CFD decompression model for CO<sub>2</sub> mixture and the influence of non-equilibrium phase transition. *Applied Energy*, Elsevier, v. 227, p. 516–524, 2018. Citado na página 22.
- LIU, X. et al. Multi-Phase CFD Modelling of CO<sub>2</sub> Releases From High-Pressure Pipelines. In: *International Pipeline Conference*. [S.l.]: American Society of Mechanical Engineers, 2016. v. 50266, p. V002T07A009. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 21.

LU, C. et al. Investigation of the effects of pipe wall roughness and pipe diameter on the decompression wave speed in natural gas pipelines. In: AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS. *International Pipeline Conference*. [S.l.], 2012. v. 45141, p. 315–322. Citado na página 22.

MARGARITIS, A. Viscous correction for pitot-probe measurements in supersonic plasma flows using a numerical approach. *Stagiaire Report*, v. 20, p. 3, 2017. Citado na página 18.

MARTYNOV, S. et al. Modelling three-phase releases of carbon dioxide from high-pressure pipelines. *Process Safety and Environmental Protection*, v. 92, n. 1, p. 36–46, 2014. Publisher: Elsevier. Citado na página 20.

MATSSON, J. E. *An introduction to ANSYS fluent 2021*. [S.l.]: SDC Publications, 2021. Citado na página 23.

MAZZOLDI, A.; HILL, T.; COLLS, J. J. Cfd and gaussian atmospheric dispersion models: A comparison for leak from carbon dioxide transportation and storage facilities. *Atmospheric environment*, Elsevier, v. 42, n. 34, p. 8046–8054, 2008. Citado na página 19.

MAZZOLDI, A.; HILL, T.; COLLS, J. J. Assessing the risk for co2 transportation within ccs projects, cfd modelling. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Elsevier, v. 5, n. 4, p. 816–825, 2011. Citado na página 19.

MCBRIDE, M. et al. Use of advanced techniques to model the dispersion of chlorine in complex terrain. *Process Safety and Environmental Protection*, Elsevier, v. 79, n. 2, p. 89–102, 2001. Citado na página 42.

MOCELLIN, P.; VIANELLO, C.; MASCHIO, G. Carbon capture and storage hazard investigation: numerical analysis of hazards related to dry ice bank sublimation following accidental carbon dioxide releases. *Chemical Engineering Transactions*, v. 43, 2015. Citado na página 42.

MOLAG, M.; DAM, C. Modelling of accidental releases from a high pressure CO2 pipelines. *Energy Procedia*, v. 4, p. 2301–2307, 2011. Publisher: Elsevier. Citado na página 13.

NESS, H. C. V. et al. *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*. [S.l.: s.n.], 2017. ISBN 978-1-259-69652-7. Citado na página 27.

NOVEMBRE, N.; PODENZANI, F.; COLOMBO, E. Numerical study for accidental gas releases from high pressure pipelines. 2006. Citado na página 20.

ORBAY, H.; SANDLER, S. I. *Modeling vapor-liquid equilibria: cubic equations of state and their mixing rules*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1998. Citado na página 18.

ORESCANIN, M. M.; AUSTIN, J. Exhaust of underexpanded jets from finite reservoirs. *Journal of Propulsion and Power*, v. 26, n. 4, p. 744–753, 2010. Citado na página 14.

PENG, D.-Y.; ROBINSON, D. B. A new two-constant equation of state. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, v. 15, n. 1, p. 59–64, 1976. Publisher: ACS Publications. Citado 3 vezes nas páginas 19, 27 e 33.

POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P. *Properties of gases and liquids*. [S.l.]: McGraw-Hill Education, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 27.

- PONTIGGIA, M. et al. Cfd model simulation of lpg dispersion in urban areas. *Atmospheric environment*, Elsevier, v. 45, n. 24, p. 3913–3923, 2011. Citado na página 20.
- PURNAMA, R.; SYAFRUDIN, S.; HUBOYO, H. The Potential Impact Analysis of Ammonia Gas Leakage On Refrigeration System Using Aloha Software (Case Study At PT. Cahaya Gunung Foods). In: *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. [S.l.]: IOP Publishing, 2020. v. 448. Issue: 1. Citado na página 13.
- RIDDLE, A. et al. Comparisons between fluent and adms for atmospheric dispersion modelling. *Atmospheric environment*, Elsevier, v. 38, n. 7, p. 1029–1038, 2004. Citado na página 19.
- SAND, I. Ø.; SJØEN, K.; BAKKE, J. R. Modelling of release of gas from high-pressure pipelines. *International journal for numerical methods in fluids*, Wiley Online Library, v. 23, n. 9, p. 953–983, 1996. Citado 3 vezes nas páginas 18, 20 e 35.
- SCARGIALI, F. et al. Modeling and simulation of dense cloud dispersion in urban areas by means of computational fluid dynamics. *Journal of hazardous materials*, Elsevier, v. 197, p. 285–293, 2011. Citado na página 42.
- SHINDELL, D. et al. Simultaneously mitigating near-term climate change and improving human health and food security. *Science*, p. 183–189, 2012. Publisher: American Association for the Advancement of Science. Citado na página 13.
- SMITH, J. M.; NESS, H. C. V.; ABBOTT, M. M. *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*. [S.l.: s.n.], 1996. ISBN 9780070592391. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 19.
- SOAVE, G. Equilibrium constants from a modified redlich-kwong equation of state. *Chemical engineering science*, Elsevier, v. 27, n. 6, p. 1197–1203, 1972. Citado na página 19.
- SPAN, R.; WAGNER, W. A new equation of state for carbon dioxide covering the fluid region from the triple-point temperature to 1100 k at pressures up to 800 mpa. *Journal of physical and chemical reference data*, American Institute of Physics for the National Institute of Standards and . . . , v. 25, n. 6, p. 1509–1596, 1996. Citado na página 19.
- TANG, X. et al. Numerical investigation of a high pressure hydrogen jet of 82 MPa with adaptive mesh refinement: The starting transient evolution and Mach disk stabilization. *international journal of hydrogen energy*, v. 42, n. 10, p. 7120–7134, 2017. Publisher: Elsevier. Citado 7 vezes nas páginas 17, 31, 33, 35, 37, 39 e 52.
- TAUSEEF, S.; RASHTCHIAN, D.; ABBASI, S. Cfd-based simulation of dense gas dispersion in presence of obstacles. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, Elsevier, v. 24, n. 4, p. 371–376, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 42.
- TENG, L. et al. Decompression characteristics of CO2 pipelines following rupture. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 36, p. 213–223, 2016. Publisher: Elsevier. Citado na página 13.
- VENDRIG, M. et al. Risk analysis of the geological sequestration of carbon dioxide. 2003. Citado na página 29.

- WAREING, C. et al. RANS modelling of sonic CO<sub>2</sub> jets. In: *THMT-12. Proceedings of the Seventh International Symposium On Turbulence Heat and Mass Transfer*. [S.l.]: Begel House Inc., 2012. Citado na página 20.
- WAREING, C. J. et al. A composite equation of state for the modeling of sonic carbon dioxide jets in carbon capture and storage scenarios. *AIChE Journal*, v. 59, n. 10, p. 3928–3942, 2013. Publisher: Wiley Online Library. Citado na página 21.
- WITLOX, H. W.; HARPER, M.; OKE, A. Modelling of discharge and atmospheric dispersion for carbon dioxide releases. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 22, n. 6, p. 795–802, 2009. Publisher: Elsevier. Citado na página 20.
- WITLOX, H. W. et al. Phast validation of discharge and atmospheric dispersion for pressurised carbon dioxide releases. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 30, p. 243–255, 2014. Publisher: Elsevier. Citado na página 14.
- WOOLLEY, R. et al. Experimental measurement and Reynolds-averaged Navier–Stokes modelling of the near-field structure of multi-phase CO<sub>2</sub> jet releases. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, v. 18, p. 139–149, 2013. Publisher: Elsevier. Citado na página 21.

# Anexos

## ANEXO A – Ferramenta *patch*

O uso desta ferramenta presente no *Fluent* é necessário quando se quer aplicar diferentes condições iniciais (como pressão e temperatura) nos elementos da malha, para isso é necessário durante a realização da geometria, a divisão dos domínios nos respectivos locais onde as condições serão impostas e nomeá-las, nas simulações realizadas para o fenômeno de despressurização, foi necessário aplicar as condições de estagnação na parte do domínio que representava a tubulação e as condições do ambiente no domínio fora da tubulação, como pode ser representado pela [Figura 26](#), pode-se observar que a geometria (denominada de *Part*) é composta de 3 corpos (*bodies*), ou seja os três domínios definidos indicam o da tubulação e os dois fora da tubulação representam a atmosfera.

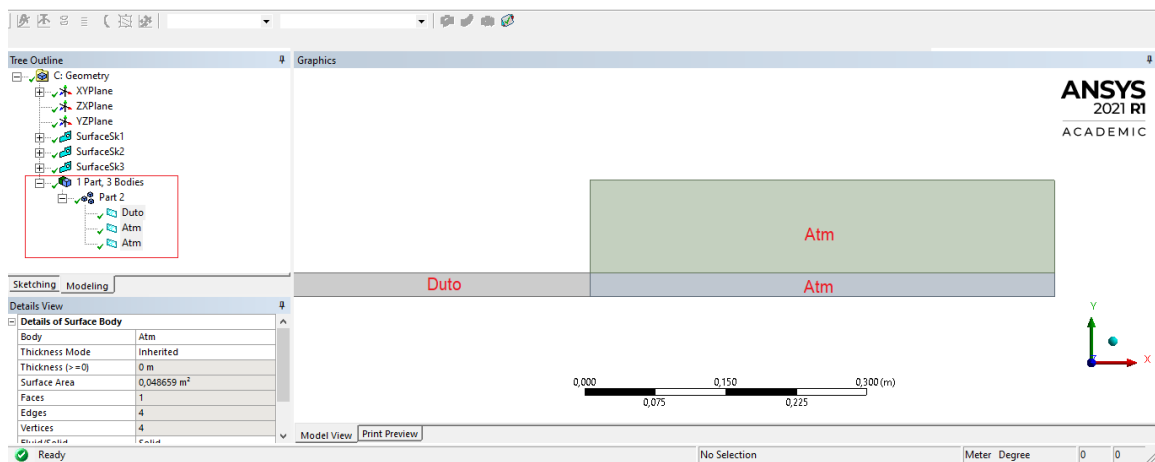
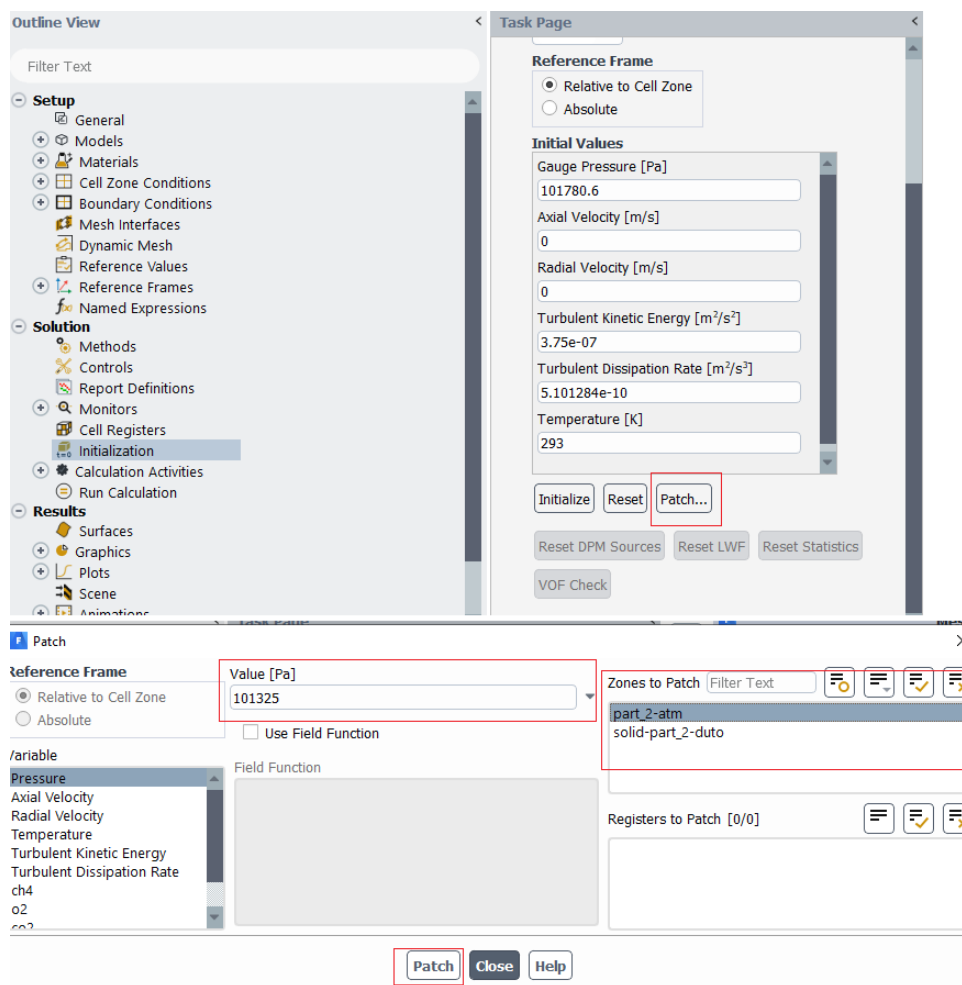


Figura 26 – Divisão da geometria para aplicação da ferramenta *patch*.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Após toda a modelagem no *Fluent*, o programa pode ser inicializado e com isso a ferramenta *patch* estará disponível para aplicação ([Figura 27](#)), com isso basta escolher qual a região onde determinada condição será imposta em *zones to patch*, em seguida escolha qual a variável desejada em *variable* e coloque seu respectivo valor em *value* e em seguida clique em *patch*. Repita o procedimento para outras variáveis desejadas em cada domínio de interesse.

Figura 27 – Passos para aplicação da ferramenta *patch*.

Fonte: Elaborado pelo autor.

## ANEXO B – UDF

A realização de um termo fonte que representasse os efeitos do empuxo foram necessários, pois como apresentado no [Capítulo 2](#) os efeitos de compressibilidade são relevantes para os fenômenos de despressurização e expansão e por isso uma equação de gás real se fez necessário também pelas condições de estagnação na tubulação, onde o gás está sujeito a altas pressões e baixas temperaturas fazendo com que as interações intermoleculares e o volume do gás seja considerável, portanto a equação de *Peng-Robinson* foi utilizada para variações da massa específica no decorrer do escoamento, para contabilizar os efeitos do empuxo em virtude da variação da massa específica, foi realizado um termo fonte na equação da quantidade de movimento na direção radial com as variáveis diretamente ligadas a estes efeitos.

Partindo da equação de conservação de quantidade de movimento na direção radial, apenas os termos relacionados com o empuxo:

$$\begin{aligned}
 S &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + F_r \\
 S &= -\frac{1}{\rho} (-\rho_0 g) - g \\
 S &= g \left( \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} \right)
 \end{aligned} \tag{B.1}$$

Organizando os termos e derivando em relação a massa específica:

$$\begin{aligned}
 S &= g \left( \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} \right) \\
 S &= \left( \frac{g\rho_0 - g\rho}{\rho} \right) \\
 S &= \frac{g\rho_0}{\rho} - \frac{g\rho}{\rho} \\
 S &= g\rho_0 \frac{1}{\rho} - g \\
 \frac{dS}{d\rho} &= g\rho_0 \frac{d}{d\rho} \left( \frac{1}{\rho} \right) - g \frac{d}{d\rho} (1) \\
 \frac{dS}{d\rho} &= -g\rho_0 \left( \frac{1}{\rho^2} \right)
 \end{aligned} \tag{B.2}$$



Com o termo fonte e sua respectiva derivada em relação a variável dependente ( $\rho$ ) obtidas, foi possível a implementação do código mostrado abaixo utilizando a função DEFINE\_SOURCE:

```

1 /*-----*\
2
3 #include "udf.h"
4
5 #define rho0 1.225
6
7 #define g 9.81
8
9 DEFINE_SOURCE(mom_source, c, t, dS, eqn)
10 {
11     real source;
12     source = g*(rho0-C_R(c, t))/(C_R(c, t));
13     dS[eqn] = -g*rho0*(1/(C_R(c, t)*C_R(c, t)));
14
15     return source;
16 }
17
18
19 // ***** //
```

Este código apresentado foi salvo na mesma pasta que estava a modelagem dos fenômenos de vazamento como um arquivo “.C”, após esse procedimento o código deve ser compilado junto ao programa, para isso no *Fluent* deve-se escolher a aba principal *User-Defined*, depois ir em *functions* e escolher a função *Compiled* como pode ser observado pela [Figura 28](#). Na aba que foi aberta clique em *Add* e selecione o arquivo salvo, neste caso o nome foi “*mom\_source1.c*”, depois clique em *ok* e em *Library Name* coloque o nome da pasta onde a UDF será compilada, neste caso foi “*libudf*” e depois aperte em *build* espere o programa compilar o código e por fim aperte em *load*.

Com a UDF já compilada no *Fluent* resta só a aplicação dela no termo fonte na equação da quantidade de movimento radial, para isso deve-se ir em *Cell Zone Conditions* (indicado pela [Figura 29](#)), em cada região denominada de “duto” e “atm” deve-se repetir o processo, clicar em *edit*, depois habilitar a função *Source Terms*, ir em *Radial Momentum* clicar em *edit* e abrirá uma nova janela, coloque 1 em *Number of Radial Momentum sources* e em seguida na seta coloque a biblioteca criada que neste caso foi a “*libudf*” e clique em *ok*.

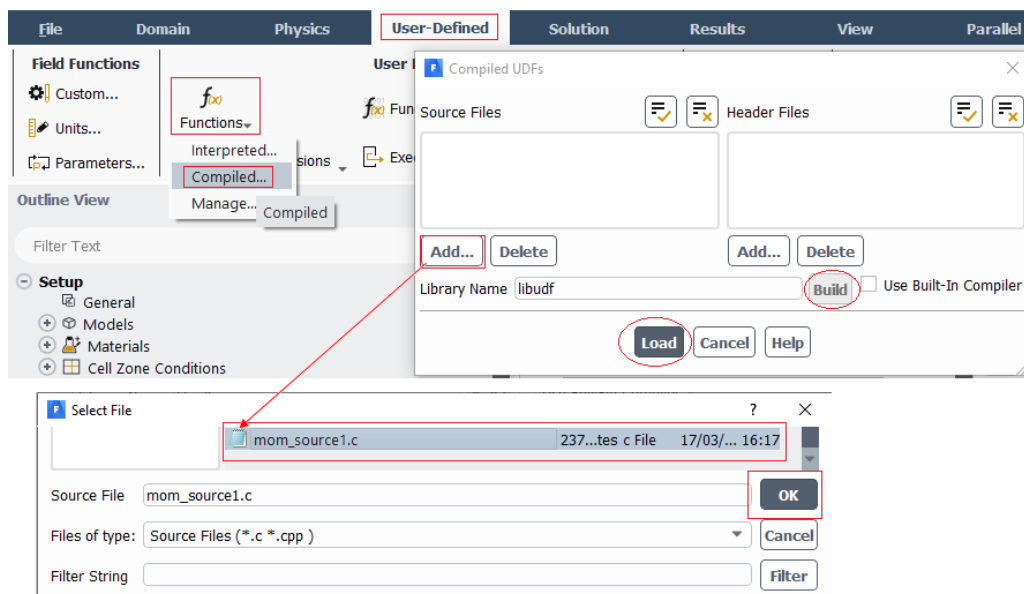


Figura 28 – Passos para compilação da UDF no *Fluent* 1/2.

Fonte: Elaborado pelo autor.

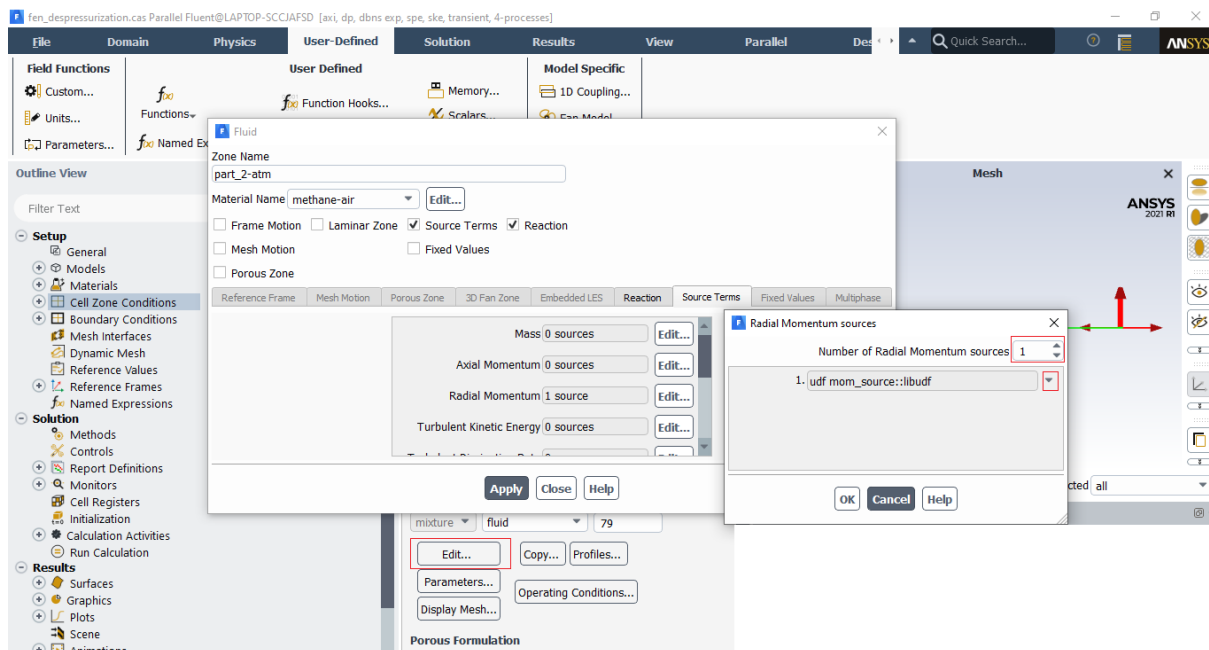


Figura 29 – Passos para compilação da UDF no *Fluent* 2/2.

Fonte: Elaborado pelo autor.

## ANEXO C – Malha adaptativa

Durante o procedimento de análise do modelo numérico proposto para o fenômeno de expansão, um teste de malha é realizado com o intuito de aproximar ao máximo os resultados em relação aos experimentos, o seu processo inclui a geração de resultados para várias quantidades de elementos de malha, como pode ser observado pela [Figura 30](#), nota-se que tanto a malha menos e mais refinada os resultados não são bons, ou seja, chega um momento que mesmo refinando ainda mais, os resultados não alteram, é interessante destacar que neste caso o melhor resultado para a malha foi de 57710 elementos e que o maior refino como um todo apenas aumentaria o esforço computacional e não afetaria de maneira positiva os resultados, mas mesmo assim ficou longe dos resultados experimentais. Como forma de otimizar o teste de malha foi aplicada uma malha adaptativa, pois os gradientes de velocidade e pressão nas regiões próximas do disco de *Mach* são acentuadas e seu procedimento foi descrito a seguir.

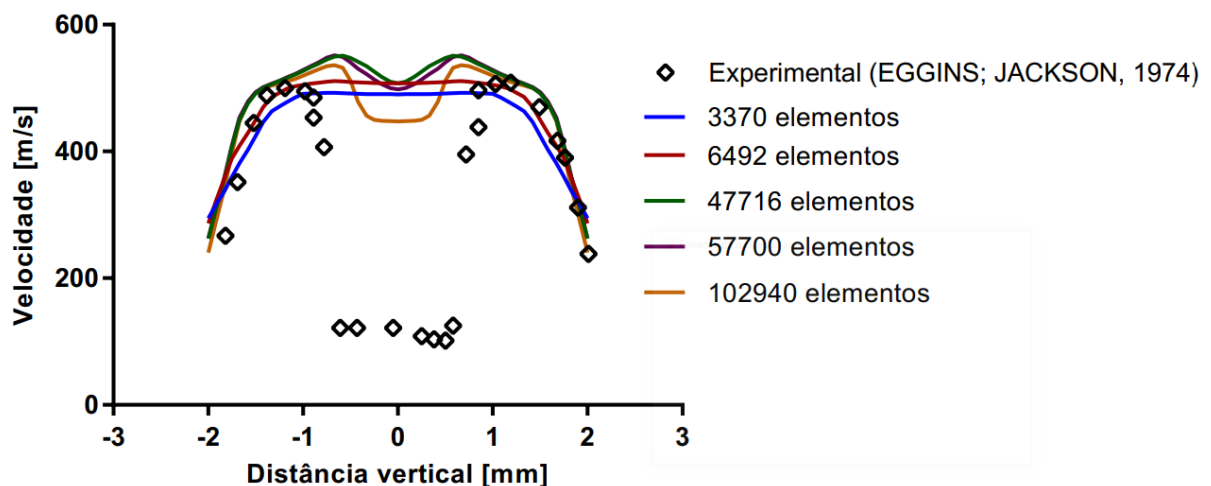


Figura 30 – Teste de malha para o fenômeno de expansão.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Para aplicação da malha adaptativa, deve-se obter os resultados preliminares, que neste caso o melhor foi o de 57710 elementos, com isso, uma nova simulação foi realizada aproveitando este resultado. Primeiro no *Fluent* ([Figura 31](#)) deve-se ir nas abas principais em *domain*, clique em *adapt*, em seguida em *Cell Registers - Field Variable*, troque o tipo para *Cells in range* e o método como *Gradient* em seguida as variáveis escolhidas para adaptar a malha seguindo o gradiente de velocidade e pressão, para a velocidade foi adotado um intervalo de 5 a 1000 e para a pressão de 100 a 10000, em seguida é necessário escolher os *Refinement Criterion* realizados e clicar em *adapt*, com isso a malha já está adaptada e pronta para ser simulada para obter os resultados.

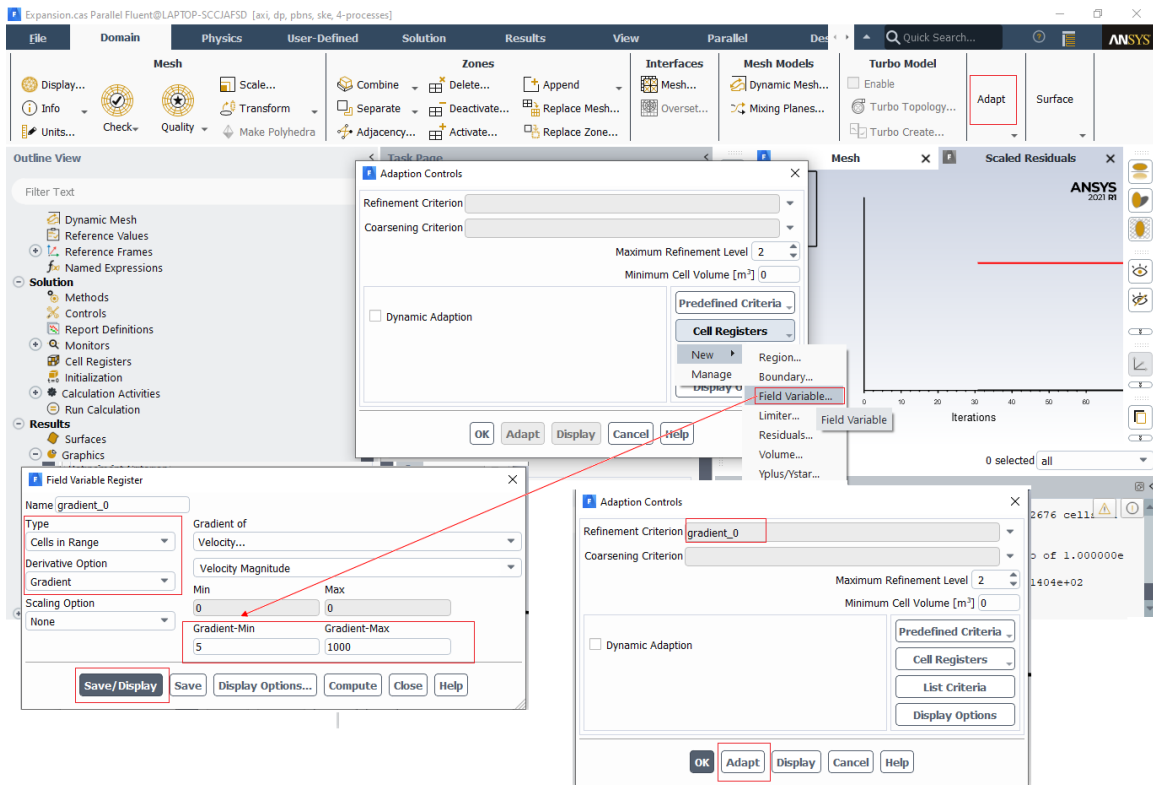


Figura 31 – Passos para implementação da malha adaptativa.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Após a malha ser adaptada seguindo os gradientes de velocidade e pressão apresentados, os resultados foram comparados com o teste de malha apresentado anteriormente obtendo a configuração da Figura 32, nota-se que esta é uma poderosa ferramenta que melhorou significamente os resultados, ou seja, não basta apenas o refino da malha como um todo, e sim o refino apenas nas regiões de maior interesse para cada problema.

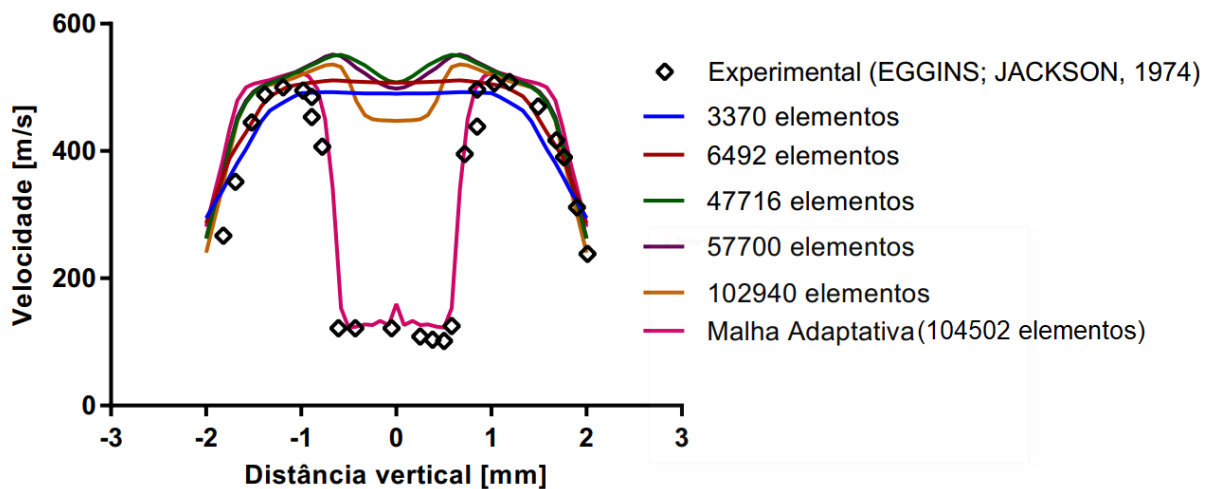


Figura 32 – Teste de malha para o fenômeno de expansão com malha adaptativa.

Fonte: Elaborado pelo autor.