



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



DEBORAH ALMEIDA DOS ANJOS

**DESENVOLVIMENTO E APERFEIÇOAMENTO DE MODELOS
MATEMÁTICOS NA PREVISÃO DE LIBERAÇÕES BIFÁSICAS EM
ATMOSFERAS EXPLOSIVAS**

CAMPINA GRANDE -PB

NOVEMBRO, 2021

DEBORAH ALMEIDA DOS ANJOS

**DESENVOLVIMENTO E APERFEIÇOAMENTO DE MODELOS
MATEMÁTICOS NA PREVISÃO DE LIBERAÇÕES BIFÁSICAS EM
ATMOSFERAS EXPLOSIVAS**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, como requisito para obtenção do Título de Doutor(a) em Engenharia Química.

Orientadores: Antônio Carlos Brandão de Araújo
José Jailson Nicácio Alves

Campina Grande -PB

Novembro, 2021

A599d Anjos, Deborah Almeida dos.
Desenvolvimento e aperfeiçoamento de modelos matemáticos na
previsão de liberações bifásicas em atmosferas explosivas / Deborah
Almeida dos Anjos. – Campina Grande, 2021.
173 f. : il. color.

Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Universidade Federal
de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2021.
“Orientação: Prof. Dr. Antônio Carlos Brandão de Araújo, Prof. Dr.
José Jailson Nicácio Alves”.

Referências.

1. Modelagem e Simulação de Processos Químicos. 2. Materiais
Inflamáveis. 3. Classificação de Áreas. 4. Liberação Bifásica.
5. Atmosfera Explosiva. 6. Gás Liquefeito. I. Araújo, Antônio Carlos
Brandão de. II. Alves, José Jailson Nicácio. III. Título.

CDU 66.08(043)

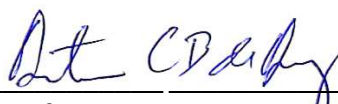
DEBORAH ALMEIDA DOS ANJOS

**DESENVOLVIMENTO E APERFEIÇOAMENTO DE MODELOS
MATEMÁTICOS NA PREVISÃO DE LIBERAÇÕES BIFÁSICAS EM
ATMOSFERAS EXPLOSIVAS**

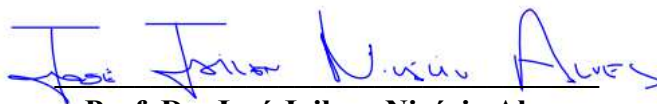
Tese aprovada como requisito para a conclusão do curso de Pós Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, pelos seguintes avaliadores:

Avaliado em: 26 / 11 / 2021

Componentes da banca avaliadora:



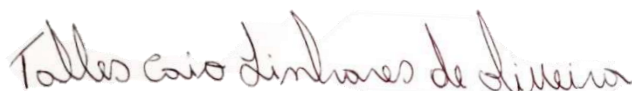
Prof. Dr. Antônio Carlos Brandão de Araújo
UAEQ/CCT/UFCG
Orientador



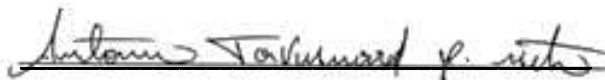
Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves
UAEQ/CCT/UFCG
Orientador



Prof. Dr. Heleno Bispo da Silva Júnior
UAEQ/CCT/UFCG
Avaliador Interno



Prof. Dr. Talles Caio L. de Oliveira
UAEQ/CCT/UFCG
Avaliador Interno



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



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



Prof. Dr. Andrey Oliveira de Souza
IFPB
Avaliador Externo

À minha família e em memória de minha avó
Antônia Daniel dos Anjos.

AGRADECIMENTOS

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

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

Aos professores e orientadores Dr. Antônio Carlos Brandão de Araújo e Dr. José Jailson Nicácio Alves pelas constantes disponibilidade, atenção, confiança em mim depositada e conhecimentos a mim transmitidos.

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

A CAPES e a PETROBRAS pelo apoio técnico e financeiro.

Aos amigos e colegas pelo incentivo e apoio constantes.

*“A tarefa não é tanto ver aquilo que ninguém viu,
mas pensar o que ninguém ainda pensou sobre
aquilo que todo mundo vê.”*

(Arthur Schopenhauer)

RESUMO

As liberações contínuas de produtos químicos inflamáveis podem resultar na formação de atmosferas explosivas em plantas de processo, podendo ocasionar incidentes de elevadas proporções. O cálculo da extensão dessas áreas de risco é, portanto, de suma importância. Para essa finalidade, atualmente, muitas organizações fazem uso das prescrições normativas existentes, as quais empregam o uso de figuras padronizadas ou pré-definidas como método para classificação de áreas. Porém, diversos autores defendem que essa estratégia possui inúmeras incertezas podendo gerar erros e incorrendo em situações de risco. Nesse sentido, esse trabalho apresenta uma alternativa mais confiável aos modelos prescritivos. Visto que muitos acidentes envolvem liberações bifásicas de inflamáveis ou tóxicos para a atmosfera, uma metodologia sistemática, baseada em estudos anteriores, é proposta para mapear as áreas explosivas geradas nesse contexto. O método inclui o uso de modelos analíticos de origem para estimativa da quantidade de produto liberado e do comportamento do jato após a expansão. Balanços de massa, momento e energia foram utilizados para prever a dispersão do jato e das gotículas nele presentes. Os efeitos da fase vapor do componente e da interação entre gotículas e gás (ar + vapor), são contabilizados. Uma nova razão de normalização para a temperatura na linha central, baseada em conceitos pré-existentes, foi elaborada para aplicação na região bifásica. Para evitar descontinuidades nos perfis de velocidade, concentração e temperatura calculados na linha central, desenvolveu-se uma alternativa para determinação das constantes de decaimento. Utilizou-se o software Matlab® como ferramenta de simulação para análise da metodologia, validando-a com dados experimentais disponíveis na literatura para líquidos armazenados sob condição de saturação e sub-resfriamento. Os resultados mostraram que o grau de sub-resfriamento influencia na quantidade de ar arrastado para dentro da nuvem de gás. Além disso, verificou-se que quanto maior for esse grau, maior será a distância necessária para a completa evaporação das gotas. Uma correlação para o cálculo do coeficiente de arraste em situações que envolvem liberações com alto grau de sub-resfriamento, é proposta. Os perfis de temperatura obtidos apresentaram uma boa concordância aos pontos experimentais se mostrando melhores que as previsões obtidas por outros autores. Os demais resultados apresentaram o comportamento esperado para cada variável do processo. Finalmente, verificou-se a aplicabilidade do modelo a situações considerando outras substâncias inflamáveis e diferentes ângulos de inclinação.

Palavras-chave: Materiais inflamáveis; classificação de áreas; liberação bifásica; atmosfera explosiva; gás liquefeito.

ABSTRACT

Continuous releases of flammable chemicals can result in the formation of explosive atmospheres in process plants, which can lead to incidents of high proportions. Calculating the extent of these risk areas is therefore of paramount importance. For this purpose, currently, many organizations make use of the existing normative prescriptions, which employ the use of standardized or pre-defined figures as a method for classifying areas. However, several authors argue that this strategy has numerous uncertainties that can generate errors and incurring in risky situations. In this sense, this work presents a more reliable alternative to prescriptive models. Since many accidents involve two-phase releases of flammables or toxics into the atmosphere, a systematic methodology, based on previous studies, is proposed to map the explosive areas generated in this context. The method includes the use of analytical source models to estimate the amount of product released and the behavior of the jet after expansion. Mass, momentum and energy balances were used to predict the dispersion of the jet and the droplets present in it. The effects of the component's vapor phase and the interaction between droplets and gas (air + vapor) are accounted. A new normalization ratio for the centerline temperature, based on pre-existing concepts, was developed for application in the two-phase region. To avoid discontinuities in the velocity, concentration and temperature profiles calculated on the centerline, an alternative was developed for determining the decay constants. The Matlab® software was used as a simulation tool to analyze the methodology, validating it with experimental data available in the literature for liquids stored under saturation and subcooling conditions. The results showed that the degree of subcooling influences the amount of air drawn into the gas cloud. Furthermore, it was found that the greater this degree, the greater the distance required for the complete evaporation of the drops. A correlation for the calculation of the drag coefficient in hypotheses involving releases with a high degree of subcooling is proposed. The temperature profiles obtained showed a good agreement with the experimental points, being better than the predictions obtained by other authors. The other results showed the expected behavior for each process variable. Finally, the applicability of the model to situations considering other flammable substances and different inclination angles was verified.

Keywords: Flammable materials; area classification; two-phase release; explosive atmosphere; liquefied gas.

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 - Tetraedro do Fogo.....	29
Figura 3.2 - Curva de Ignição.....	30
Figura 3.3 - Faixa de Inflamabilidade.....	31
Figura 3.4 - Classificação de área em torno de um tanque de acordo com: (a) Norma internacional IEC; (b) Práticas americanas.....	35
Figura 3.5 - Curva de saturação para uma substância química hipotética.....	39
Figura 3.6 - Possíveis situações para emissão e dispersão da substância liberada.....	40
Figura 3.7 - Representação esquemática do jato bifásico.....	41
Figura 3.8 - Regimes de Quebra de Partículas.....	43
Figura 4.1 - Fluxograma de obtenção das condições de liberação.....	48
Figura 4.2 - Curva tri-linear para o diâmetro médio da gota em função do superaquecimento.....	54
Figura 4.3 - Forças atuando na gota.....	57
Figura 4.4 - Gráfico utilizado como base para avaliação da formação de chuva.....	64
Figura 4.5 - Ilustração do ângulo de inclinação do jato bifásico.....	66
Figura 4.6 - Esquema representativo para a seção transversal de um jato elevado e ao nível do solo.....	69
Figura 4.7 - Esquema de referência para determinação da extensão da área classificada.....	76
Figura 4.8 – Representação esquemática do tronco de cone e de pirâmide utilizados para cálculo do volume inflamável.....	78
Figura 4.9 - Esquema de implementação do modelo em MATLAB.....	79
Figura 4.10 - Fluxograma para implementação do modelo.....	81
Figura 5.1 - Ajuste do coeficiente de arraste ao número de Reynolds no orifício para os casos experimentais estudados.....	90
Figura 5.2 - Temperatura do gás na linha central.....	96
Figura 5.3 - Perfis na linha central: (a) velocidade; (b) concentração; (c) trajetória da linha central.....	96
Figura 5.4 - Perfis para estimativa de chuva: (a) altura; (b) diâmetro das gotas.....	97
Figura 5.5 - Perfis típicos para gotas de propano em liberações flashing: (a) temperatura; (b) velocidade; (c) massa.....	98
Figura 5.6 - Temperatura média do gás.....	98
Figura 5.7 – Isolinhas na direção vertical.....	99
Figura 5.8 - Isolinhas laterais.....	99
Figura 5.9 - Comparação entre Coldrick e o modelo proposto para a temperatura. (a) Modelo; (b) Phast; (c) Phast com umidade; (d) Coldrick.....	100
Figura 5.10 - Comparação entre Coldrick, Phast e o modelo proposto para a concentração.....	101
Figura 5.11 - Representação da posição dos termopares.....	102
Figura 5.12 - Temperatura na linha central: (a) Caso 1; (b) Caso 2; (c) Caso 3; (d) Caso 4; (e) Caso 5; (f) Caso 6; (g) Caso 7; (h) Caso 8.....	106
Figura 5.13 - Temperatura na linha central para o modelo proposto e Ichard <i>et al.</i> (2009): (a) Caso 1; (b) Caso 2; (c) Caso 3; (d) Caso 4.....	108
Figura 5.14 - Diâmetro e altura da gota para prever rainout: (a) Caso 1; (b) Caso 2; (c) Caso 3; (d) Caso 4; (e) Caso 5; (f) Caso 6; (g) Caso 7; (h) Caso 8.....	109

Figura 5.15 - Concentração e trajetória na linha central: (a) Caso 1; (b) Caso 2.....	111
Figura 5.16 - Isolinhas verticais: (a) caso 1; (b) caso 2.	112
Figura 5.17 - Isolinhas laterais: (a) caso 1; (b) caso 2	113
Figura 5.18 - Temperatura na linha central para: (a) pentano; (b) hexano; (d) heptano; (d) octano.....	116
Figura 5.19 - Avaliação da trajetória e tamanho da gota para previsão de rainout: (a) pentano; (b) hexano; (c) heptano; (d) octano.....	116
Figura 5.20 - Isolinhas verticais: (a) pentano; (b) hexano; (c) heptano; (d) octano.	117
Figura 5.21 - Isolinhas laterais: (a) pentano; (b) hexano; (c) heptano; (d) octano.....	118
Figura 5.22 - Isolinhas verticais para o caso 1: (a) 30°; (b) 45°; (c) 60°; (d) 85°.....	120
Figura 5.23 - Isolinhas laterais para o caso 1: (a) 30°; (b) 45°; (c) 60°; (d) 85°.....	120
Figura 5.24 - Isolinhas verticais para o caso 1: (a) -30°; (b) -45°; (c) -60°; (d) -85°.....	121
Figura 5.25 - Isolinhas laterais para o caso 1: (a) -30°; (b) -45°; (c) -60°; (d) -85°.....	122
Figura C.1- Resultados para o caso 1: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (f) velocidade do gás na linha central.....	140
Figura C.2- Resultados para o caso 2: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (f) velocidade do gás na linha central.....	141
Figura C.3- Resultados para o caso 3: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (f) velocidade do gás na linha central; (g) trajetória da linha central.....	142
Figura C.4- Isolinhas para o caso 3: (a) pluma vertical (b) pluma lateral; (c) pluma lateral uniforme.....	143
Figura C.5- Resultados para o caso 4: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (f) velocidade do gás na linha central; (g) trajetória da linha central.....	144
Figura C.6- Isolinhas para o caso 4: (a) pluma vertical (b) pluma lateral; (c) pluma lateral uniforme.....	145
Figura C.7- Resultados para o caso 5: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (f) velocidade do gás na linha central; (g) trajetória da linha central.....	146
Figura C.8- Isolinhas para o caso 5: (a) pluma vertical (b) pluma lateral; (c) pluma lateral uniforme.....	147
Figura C.9- Resultados para o caso 6: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (f) velocidade do gás na linha central; (g) trajetória da linha central.....	148
Figura C.10- Isolinhas para o caso 6: (a) pluma vertical (b) pluma lateral; (c) pluma lateral uniforme.....	149
Figura C.11- Resultados para o caso 7: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (f) velocidade do gás na linha central; (g) trajetória da linha central.....	150
Figura C.12- Isolinhas para o caso 7: (a) pluma vertical (b) pluma lateral; (c) pluma lateral uniforme.....	151
Figura C.13- Resultados para o caso 6: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (f) velocidade do gás na linha central; (g) trajetória da linha central.....	152
Figura C.14- Isolinhas para o caso 6: (a) pluma vertical (b) pluma lateral; (c) pluma lateral uniforme.....	153

LISTA DE QUADROS

Quadro 3.1 - Definição das zonas de risco.	34
Quadro 3.2 - Definição de Divisão para atmosfera explosiva.	35
Quadro 4.1 - Equações do modelo de Leung.	49
Quadro 4.2 - Algoritmo para obtenção de BT.	62
Quadro 4.3 - Correlações para algumas variáveis do jato.	68
Quadro A.1 - Correlações para as propriedades termodinâmicas e de transporte.	133

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 - Limites de inflamabilidade para determinadas substâncias.....	32
Tabela 3.2 - Classificação da zona de risco com relação ao grau da fonte de risco.	37
Tabela 5.1 - Coeficiente de arraste e estado do líquido.	91
Tabela 5.2 - Diâmetro médio de gota obtido pelos diferentes modelos.....	92
Tabela 5.3 - Comparação entre as extensões obtidas pelos modelos e a experimental.	93
Tabela 5.4 - Diâmetro médio para situação de líquido metaestável.	94
Tabela 5.5 - Parâmetros para liberação de propano por Allen (1995).	94
Tabela 5.6 - Resultados obtidos para as etapas iniciais.	95
Tabela 5.7 - Condições experimentais utilizadas pelo projeto FLIE.	103
Tabela 5.8 - Constantes de decaimento obtidas para a região monofásica.	104
Tabela 5.9 - Erro relativo para a vazão de liberação.....	104
Tabela 5.10 - Principais resultados para as simulações do Projeto INERIS-FLIE.....	105
Tabela 5.11 - Extensão da área classificada.....	111
Tabela 5.12 - Volumes Inflamáveis.....	113
Tabela 5.13 - Principais Resultados.....	115
Tabela B.1 - Valores dos parâmetros e de algumas propriedades dos componentes.....	136

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Descrição	Unidade
A_e	Área da seção transversal na saída	m^2
B_M	Número de transferência de massa de Spalding	-
B_T	Número de transferência de calor de Spalding	-
C_D	Coefficiente de arraste	-
C_p	Calor específico	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
D_{AB}	Coefficiente de difusão	$m^2.s^{-1}$
g	Aceleração da gravidade	$m.s^{-2}$
h	Altura da fonte	m
MW	Peso molecular	$kg.mol^{-1}$
P	Pressão	$N.m^{-2}$
Pr	Número de Prandtl	-
P_x	Momento do jato bifásico na direção x	$kg.m.s^{-2}$
P_y	Momento do jato bifásico na direção y	$kg.m.s^{-2}$
q	Vazão	$kg.s^{-1}$
q_M	Momento total do jato bifásico	$kg.m.s^{-2}$
R	Constante dos gases ideais	$J.mol^{-1}.K^{-1}$
Re	Número de Reynolds	-
Sc	Número de Schmidt	-
T	Temperatura	K
T_a	Temperatura ambiente	K
T_b	Temperatura de bolha	K
T_g	Temperatura do gás	K
u	Velocidade	$m.s^{-1}$
u_w	Velocidade do vento	$m.s^{-1}$
We	Número de Weber	$kg.kg^{-1}$
y	Concentração	-

LISTA DE SÍMBOLOS GREGOS

Símbolo	Descrição	Unidade
μ	viscosidade dinâmica	Pa.s
ρ	Densidade	kg.m ⁻³
σ_s	Tensão superficial	N.m
ϕ_v	Qualidade (fração mássica de vapor)	kg.kg ⁻¹

SUBÍNDICES

a – ar ambiente;
d – gota;
film – filme;
fuel – propriedade do combustível;
g – gás;
s – superfície da gota;
v – vapor;
x – direção axial;
y – direção radial;
 ∞ - distante da gota (no ambiente);

SUMÁRIO

Capítulo 1	18
Introdução.....	18
1.1 Contextualização	18
1.2 Justificativas	20
1.3 Objetivos.....	21
1.3.1 Geral.....	21
1.3.2 Específicos	21
1.4 Estrutura da Tese	21
1.5 Contribuições da Tese.....	22
Capítulo 2	24
Revisão Bibliográfica.....	24
Capítulo 3	28
Conceitos Fundamentais	28
3.1 Limites de Inflamabilidade.....	28
3.2 Atmosferas Explosivas.....	32
3.3 Classificação de Áreas	33
3.3.1 Critérios de Classificação de Áreas	34
3.4 Fontes de Risco	36
3.5 Extensão de Zonas.....	38
3.6 Liberações Bifásicas.....	38
3.6.1 Mecanismos de Quebra da Gota	42
3.6.2 Rainout.....	44
Capítulo 4	45
Modelagem	45
4.1 Estimativa das Variáveis no Orifício de Liberação.....	46
4.2 Estimativa das Variáveis de Expansão.....	50
4.2.1 Diâmetro Médio da Gota	51
4.2.1.1 Modelo Recomendado pelo CCPS	51
4.2.1.2 Modelo Recomendado pelo Yellow Book.....	53
4.2.1.4 Modelo de Tilton e Farley (1990).....	55
4.3 Modelagem para a Dispersão de Gotículas	56
4.3.1 Dinâmica das Gotículas	57

4.3.2 Modelagem da Vaporização de Gotículas	59
4.3.2.1 Avaliação das Propriedades no Filme em Torno da Gota	61
4.3.2.2 Cálculo das Propriedades de Mistura no Filme	62
4.3.3 Temperatura da Gota.....	63
4.3.4 Estimativa de Rainout.....	64
4.4 Modelagem Matemática do Jato	64
4.6 Modelagem da Linha Central do Jato	72
4.6.1 Região Bifásica	72
4.6.2 Região Monofásica	74
4.7 Extensão da Área Classificada.....	75
Capítulo 5	89
Resultados e Discussões	89
5.1 Correção do Coeficiente de Arraste para Aplicação na Região Monofásica	89
5.2 Avaliação dos Modelos para o Diâmetro Médio das Gotas.....	91
5.3 Allen (1995)	94
5.3 Coldrick (2016)	100
5.4 Projeto INERIS - FLIE.....	102
5.5 Aplicabilidade do Modelo.....	114
5.5.1 Simulações para Teste	114
5.5.1.1 Temperatura na Linha Central	114
5.5.1.2 Avaliação da Ocorrência de Chuva.....	114
5.5.1.3 Isolinhas	117
5.5.2 Variação do Ângulo de Liberação	119
5.5.2.1 Inclinação Positiva.....	119
5.5.2.2 Inclinação Negativa	121
Capítulo 6	123
Conclusão	123
6.1 Considerações Finais.....	123
6.2 Sugestões para Trabalhos Futuros.....	124
REFERÊNCIAS	125
APÊNDICE	132
APÊNDICE A – Correlações para as Propriedades Termodinâmicas e de Transporte.	133
APÊNDICE B – Parâmetros e Propriedades.....	136
APÊNDICE C – Resultados Obtidos pela Simulação para o Projeto INERIS - FLIE.....	140
C.1 Caso 1 – Propano.....	140

C.2 Caso 2 – Butano (X = 1.75).....	141
C.3 Caso 3 – Butano (X = 2.44).....	142
C.4 Caso 4 – Butano (X = 4).....	144
C.5 Caso 5 – Butano (X = 3.74).....	146
C.6 Caso 6 – Butano (X = 2.32).....	148
C.7 Caso 7 – Butano (X = 1.72).....	150
C.8 Caso 8 – Butano (X = 1.74).....	152
APÊNDICE D – Rotinas em ambiente MATLAB.....	154
D.1 Rotina “parameters.m”	154
D.2 Rotina “Propriedades.m”	156
D.3 Rotina “Input.m”	157
D.4 Rotina “enecritical.m”	159
D.5 Rotina “enecriticallow.m”	159
D.6 Rotina “P_Vapor.m”	159
D.7 Rotina Principal “Jet.m”	160
D.8 Rotina “CCPS_diameter.m”	167
D.9 Rotina “Phast_diameter.m”	167
D.10 Rotina “myevents.m”	168
D.11 Rotina “ftwo3.m”	168
D.12 Rotina “gasdisp2.m”	172

Capítulo 1

Introdução

1.1 Contextualização

Na indústria de processos, situações que envolvem o processamento e armazenamento de substâncias inflamáveis comumente produzem ambientes potencialmente explosivos. Seja para aplicação em plantas químicas e petroquímicas, refinarias de petróleo, óleo e gás, indústrias de alimentos e plataformas de exploração de petróleo, quando essas substâncias inflamáveis entram em contato com o oxigênio do ar, elas podem criar uma atmosfera explosiva. Se essa atmosfera for inflamada, a explosão resultante pode provocar sérios danos às pessoas e ao meio ambiente.

Uma liberação acidental de substâncias inflamáveis normalmente resultará em vários efeitos físicos potenciais. Dependendo das propriedades e condições de armazenamento do material, vários fenômenos típicos podem ocorrer, tais como: incêndio, explosões ou exposições tóxicas. Causas comuns de tais incidentes incluem design inadequado de equipamentos e controle inadequado de potenciais fontes de ignição (JORDÃO e FRANCO, 2002; NETO, 2010).

Acidentes ocorridos em várias partes do mundo tiveram como origem um equipamento elétrico indevidamente especificado para operar em ambientes de atmosfera explosiva. Isso se deve ao fato de que tais equipamentos são fontes de risco potencial uma vez que os níveis de energia presentes em suas partes superam em muito, na grande maioria dos casos, aqueles mínimos necessários para iniciar um incêndio ou uma explosão. Assim, a seleção, instalação, montagem, manutenção e o reparo desses dispositivos devem ser feitos de tal forma que possa garantir a segurança dessas áreas e das pessoas que nelas transitam (BOSSERT, 2001).

A fim de avaliar o perigo potencial, os chamados modelos de “avaliação de consequências” podem ser aplicados para prever o comportamento físico, ou os fenômenos que ocorrem na liberação de uma substância perigosa. Nesse aspecto, verifica-se a importância de

se realizar estudos de classificação de áreas que têm por finalidade básica mapear e determinar onde serão localizadas e registradas as áreas que possuem atmosferas potencialmente explosivas denominadas de áreas classificadas (JORDÃO e FRANCO, 2002; NETO, 2010).

A classificação de áreas visa obter as dimensões e os volumes das áreas de risco assegurando que a especificação e a instalação dos equipamentos elétricos atendam aos requisitos e exigências das normas técnicas aplicáveis. Segundo Erthal *et al.* (2004), o projeto de classificação de áreas deve ser feito de modo que as áreas classificadas tenham a menor extensão possível, mantendo algum nível de segurança, e evitando dados conservativos em excesso ou não contemplando situações que podem gerar riscos desnecessários (BULGARELLI, 2009; ERTHAL *et al.*, 2004).

Atualmente no Brasil, as normas utilizadas nesse segmento baseiam-se em normas internacionais IEC (*International Electrotechnical Commission*). As normas brasileiras que estabelecem as regras de engenharia e segurança nas instalações elétricas em áreas com a presença de atmosferas explosivas pertencem à série ABNT NBR IEC 60079, no entanto, diversas empresas químicas ou petroquímicas, à exemplo da Petrobras, também possuem os próprios padrões internos de classificação de áreas (BULGARELLI, 2009; SILVA, 2017).

Além dessas normas, as empresas que atuam diretamente no segmento de prevenção de explosões precisam atender aos direcionamentos estabelecidos pela norma regulamentadora NR 10, que estabelece os requisitos e condições mínimas para segurança em instalações e serviços em eletricidade e a NR 20 que trata da segurança e saúde no trabalho com gases e líquidos inflamáveis e combustíveis.

As prescrições normativas atualmente em uso são bastante limitadas no que tange ao cálculo da extensão das áreas de risco, pois fazem uso genérico de métodos de classificação de áreas por figuras padronizadas ou pré-definidas. Segundo Jordão (2002), o uso dessas figuras pode induzir a erros por excesso, ou mesmo levar a uma falsa impressão de segurança, pois dá margem a interpretação errônea, incorrendo em situação de risco.

Na indústria de processos, é prática comum armazenar e manusear substâncias inflamáveis, que são gasosas à temperatura atmosférica, como líquidos pressurizados ou refrigerados. Em caso de liberação acidental, o produto liberado no ar ambiente é subitamente colocado sob condições de temperatura e pressão que são tais que uma parte do líquido vaporiza violentamente, fenômeno geralmente chamado de "*flash*", dando origem a um jato bifásico. Em tais condições, o líquido se quebra em gotas finas formando uma nuvem de aerossol, cujo comportamento na atmosfera afeta as distâncias de dispersão. Os fenômenos físicos que

ocorrem após a liberação para a atmosfera são principalmente três: expansão para pressão ambiente, atomização líquida (*break-up*) e *rainout*.

Dada a complexidade dos fenômenos de liberação, entender e prever o comportamento dessas liberações na atmosfera é essencial para uma análise segura desses tipos de sistemas. Assim, o uso de modelos de origem e dispersão que descrevem como o material é liberado, transportado e dispersado, é uma alternativa mais confiável aos modelos prescritivos.

1.2 Justificativas

Há uma grande preocupação com liberações acidentais e dispersão de substâncias tóxicas e inflamáveis para a atmosfera em ambientes industriais, devido ao grande risco de incêndios e explosões associados a esses cenários. Alguns acidentes podem ser causados por falhas catastróficas, cuja possibilidade de ocorrência é remota. Porém, a ocorrência de pequenos vazamentos durante a operação normal de uma unidade é mais comum e pode se tornar precursora de incidentes de elevadas proporções. Assim, verifica-se a necessidade de definir a área onde será necessário o controle de fontes de ignição de modo a facilitar a seleção e instalação de equipamentos a serem utilizados com segurança no ambiente analisado (BAHADORI, 2013; CRUZ, 2012).

Uma vez que a indústria de processos trabalha com sistemas que operam sob condições de armazenamento e transporte de gás liquefeito, cujos materiais são muitas vezes uma mistura de duas ou mais substâncias químicas, muitos acidentes envolvem liberações bifásicas do tipo *flashing* de componentes tóxicos para a atmosfera. Dessa forma, o estudo de análise de risco envolvendo esse tipo de liberação é de fundamental importância para segurança nas instalações industriais.

De acordo com Erthal *et al.* (2004), a utilização de figuras padronizadas de modo mecânico produz resultados duvidosos que podem superdimensionar as áreas classificadas, aumentando o custo do projeto e gerando uma falsa impressão de segurança acarretando em situações de riscos desnecessárias. Dessa forma, o correto dimensionamento da área classificada é de fundamental importância para a segurança e deve ser realizado adequadamente.

Dada a natureza tóxica ou inflamável dos materiais armazenados como gases liquefeitos sob pressão, é importante prever esses efeitos perigosos no âmbito da avaliação de risco. Portanto, o desenvolvimento de modelos capazes de simular os escoamentos bifásicos

resultantes de rompimentos ou vazamentos de um vaso contendo gás liquefeito é de grande interesse (LACOME *et al.*, 2019).

Alguns estudos disponíveis na literatura apenas preveem o comportamento de jatos bifásicos, não sendo suficiente para aplicação no controle de fontes de ignição uma vez que há a formação de nuvens de vapor e ocasionalmente, de uma poça. Outros modelos existentes e amplamente utilizados são avaliados apenas para a emissão e dispersão de jatos de gás.

1.3 Objetivos

1.3.1 Geral

Desenvolvimento de um método e aperfeiçoamento de modelos matemáticos, a partir de uma visão sistemática, para determinação da extensão de áreas classificadas decorrentes de liberações bifásicas de componentes inflamáveis.

1.3.2 Específicos

- Estimar a ocorrência de chuva (*rainout*);
- Determinação dos perfis de temperatura, velocidade e concentração na linha central do jato;
- Determinação da extensão da área classificada;
- Avaliação do volume inflamável por meio da geração de isocurvas.

1.4 Estrutura da Tese

Este estudo está dividido em seis capítulos. Esse primeiro capítulo contextualiza a problematização do tema, apresenta as justificativas que motivaram a realização da pesquisa bem como os objetivos e contribuições esperadas.

O segundo capítulo traz uma revisão bibliográfica dos principais estudos realizados sobre os processos de liberações acidentais aplicáveis ao tema de classificação de áreas.

No terceiro capítulo são definidas algumas propriedades de substâncias que podem influenciar na classificação de áreas e abordados conceitos gerais cuja compreensão é necessária para o entendimento dos riscos inerentes às liberações acidentais;

A metodologia é detalhada no Capítulo 4 onde é apresentada a modelagem matemática do processo bem como o procedimento para implementação em ambiente Matlab® e posterior validação.

O quinto capítulo detalha os estudos experimentais utilizados como referência para validação do modelo e apresenta uma discussão dos importantes resultados obtidos nesse trabalho.

Finalmente, no Capítulo 6 são apresentadas as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

1.5 Contribuições da Tese

Este trabalho apresenta um método para determinar o tamanho das áreas classificadas de liberações bifásicas usando um procedimento sistemático. Assim, utilizou-se modelos aplicados à jatos de gás para situações de liberação bifásica, no entanto, para jatos de gás não há uma fase de expansão caracterizada pelo fenômeno *flashing*. Em vista disso, é importante verificar a necessidade de ajustes ou modificações devido à presença da fase líquida. Nesse sentido, elaborou-se uma alternativa para determinação das constantes de decaimento necessárias para o cálculo da velocidade, concentração e temperatura na linha central.

Para a determinação da temperatura do gás na linha central utilizou-se o princípio de normalização de Thring e Newby (KATAOKA *et al.*, 1982; ILANGOVA, 2016). No entanto, esse modelo foi aplicado à jatos de gás em campo distante e, de acordo com os testes realizados na elaboração desse trabalho, a razão de Thring e Newby não é aplicável à região bifásica. Sendo assim, uma nova razão de normalização para a temperatura na linha central, baseada em conceitos pré-existentes, foi elaborada e os resultados obtidos se mostraram estar de acordo com os experimentais.

Durante a validação do modelo observou-se que na região monofásica, o grau de sub-resfriamento do líquido armazenado exerce influência na quantidade de ar arrastado devido ao momento do jato. Em outras palavras, com base nos perfis experimentais de temperatura do gás na linha central, o valor disponível na literatura para o coeficiente de arraste α_1 não gera a contribuição esperada de ar arrastado no fenômeno de troca de calor que o processo envolve. Além disso, o manual técnico do Quadvent 2 (2016) considera esse parâmetro como livre deixando em aberto que o coeficiente de arraste ideal pode ser diferente para um jato bifásico.

Assim, uma correlação para obtenção do coeficiente de arraste, desenvolvida com base nos dados experimentais, é proposta. Uma maneira de avaliar o grau de confiança desse ajuste é observar o perfil de temperatura do gás na linha central uma vez que a quantidade de ar arrastado para dentro do jato irá influenciar no balanço de energia. Verificou-se que os resultados obtidos com o parâmetro ajustado são aprimorados.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

A maior parte do trabalho experimental e teórico realizado até agora sobre a liberação bifásica foi restrita a modelagem de liberações de componentes puros. Kukkonen (1990), por exemplo, prevê a evolução de jatos bifásicos de amônia e água. Fauske e Epstein (1988), avaliaram a taxa de descarga para condições de fluxo sub-resfriado, saturado e bifásico, o comportamento do jato expandido, incluindo aspectos do arraste do ar, vaporização e resfriamento, bem como a extensão do regime de jatos bifásicos para amônia e ácido hidrofluorídrico em diferentes condições. Dunbar *et al.* (1994) estudaram a dispersão e evaporação de gotículas formadas a partir de liberações acidentais de líquidos armazenados sob pressão para calcular as concentrações no ar e intervalos de risco.

Papadourakis *et al.* (1991) examinaram os limites de evaporação de gotículas de componentes puros em jatos bifásicos resultantes da liberação de líquidos superaquecidos. Dois modelos foram desenvolvidos com base nos balanços de massa, momento e energia. O primeiro modelo é usado para o cálculo do limite superior de evaporação o qual pressupõe que as gotículas líquidas viajam através do ar atmosférico estagnado, sem contrapressão e com velocidade relativa diferente de zero. O segundo modelo é usado para o cálculo do limite inferior de evaporação, assumindo que as gotículas de líquido do material liberado são transportadas junto com a fase vapor e que não existe movimento relativo entre as fases.

Em Lacombe *et al.* (2014) o objetivo do trabalho foi desenvolver um novo modelo numérico com o objetivo de simular um jato bifásico resultante de um vazamento em uma tubulação contendo um gás liquefeito. O trabalho foca especialmente no efeito da vaporização e processo de ebulição no jato. Um modelo de equilíbrio termodinâmico para vaporização foi desenvolvido. Para testar o modelo, foi considerado um jato bifásico atmosférico de butano, proveniente de um orifício circular. Utilizando o mesmo componente, Barros *et al.* (2017) prever via fluidodinâmica computacional a liberação bifásica em ambiente aberto e determina a extensão da nuvem de dispersão gasosa para classificação de área.

Coldrick (2016) descreve a modelagem CFD de jatos *flashing* de propano em pequena escala e compara com dados experimentais e previsões de modelo integral. Anjos (2017) propôs uma metodologia sistemática baseada no Modelo de Equilíbrio Homogêneo (HEM), em Bosch *et al.* (2005), Fausk e Epstein (1988) e nos estudos de Kukkonen (1990). O método inclui um modelo analítico para prever a extensão da região bifásica acoplado a um modelo de jatos de gás. Entretanto, tal metodologia não faz uso das equações de conservação aplicando apenas correlações simplistas.

Souza *et al.* (2018) desenvolveram uma correlação para previsão de extensão de área classificada devido a emissões fugitivas de gás. A correlação é baseada em dados de simulação computacional de dinâmica de fluidos (CFD). O modelo CFD foi validado experimentalmente e o efeito de cada variável na extensão da área perigosa foi obtido a partir dos resultados CFD levando a uma correlação analítica para uso prático na estimativa da extensão da área de risco.

Oliveira *et al.* (2018) também faz uso de fluidodinâmica computacional (CFD) para prever a extensão e o volume da área perigosa resultante de liberações bifásicas. A influência do vento e das condições de liberação na classificação da área é analisada. Um novo parâmetro em função do volume e extensão do jato é proposto para a classificação de áreas perigosas.

Mais recentemente, Barros *et al.* (2020) analisaram a influência da magnitude e direção da velocidade do vento na classificação de áreas perigosas. Os autores avaliaram a extensão e o volume de vazamentos de metano, propano e hidrogênio a partir de um modelo CFD e mostraram que esses parâmetros assim como o tipo de zona, são influenciados pela velocidade do vento.

Barros (2020) aplicou técnicas de CFD em estudos de casos de vazamento bifásico visando obter um modelo que prever o fluxo bifásico de componente puro para obter o volume e extensão da nuvem inflamável como resultado. Seu trabalho avaliou duas abordagens diferentes para obter as condições de liberação para classificação de áreas perigosas. A primeira condição, denominada jato bifásico de equilíbrio, no qual assume-se o modelo de equilíbrio homogêneo, enquanto na abordagem de jato sem equilíbrio o autor assume uma condição de superaquecimento no orifício.

Lacome *et al.* (2020) aplicaram modelos experimentais e numéricos para estudar o jato bifásico resultante de quaisquer lançamentos de gases liquefeitos pressurizados com o objetivo de aprofundar a compreensão dos fenômenos que resultam em jatos *flashing* bifásicos. Seus estudos focaram especialmente no efeito de resfriamento que foi evidenciado por experimentos em larga escala sobre as liberações de butano e propano realizadas durante o projeto *Flashing*

Liquids in Industrial Environment (FLIE). Os autores assumiram o modelo de equilíbrio termodinâmico no qual a temperatura das fases líquida e vapor são iguais.

Lim e Ng (2021) criaram um modelo de vazamento para vazamentos flashings de Gás Natural Liquefeito ou GNL (em inglês referido pela sigla LNG, de *Liquefied Natural Gas*). O modelo de vazamento consiste em nove equações e quantifica parâmetros de vazamento para avaliação de risco. Um uso potencial deste modelo de vazamento é fornecer uma condição de limite de vazamento equivalente para simulação de dinâmica de fluido computacional (CFD) para prever a dispersão do gás. Segundo os autores, validação adicional com ferramentas de análise de risco e experimentos reais é necessária para confirmar se o modelo de vazamento é adequado para uso.

A teoria de liberações bifásicas para componentes puros pode ser estendida para tratar misturas multicomponentes, mas se torna mais complexa. Melhem e Saini (1992) desenvolveram um modelo para dispersão de jatos bifásicos tipo *flashing* para misturas multicomponentes. Muralidhar *et al.* (1995) apresentaram um modelo para liberações de multicomponentes, sem restringir as gotas no jato para estar em equilíbrio com o ar arrastado, aplicando a sistemas de HF / aditivo sub-resfriados multicomponentes e incluindo os efeitos da formação de aerossol.

Embora esses estudos possam ajudar a prever o comportamento dos jatos bifásicos, eles não são suficientes para o controle de fontes de ignição, uma vez que esse tipo de liberação também pode resultar na formação de uma nuvem de vapor além de poder formar uma poça. Nesse caso, devido a sua disseminação e evaporação, a poça é considerada uma fonte de uma nuvem de gás pesada. Alguns estudos que descrevem a formação e evaporação da poça são reportados na literatura. Cavanaugh *et al.* (1994) desenvolveram um modelo aprimorado para simulação de emissões de vapor a partir uma liberação de líquido multicomponente incorporando três mecanismos para transferência para a fase gasosa: (i) líquido *flashing*, (ii) *entrainment* como aerossol e (iii) evaporação de poça líquida. Drivas (1982) apresentou uma formulação teórica que possibilita o cálculo das taxas de evaporação de compostos individuais em uma mistura líquida multicomponente, como uma função do tempo. Fernandez *et al.* (2012) descrevem um novo modelo robusto para formação, vaporização e dissolução de uma poça de componentes múltiplos.

Como pode ser observado, a maioria dos estudos recentes fazem uso de modelos numéricos e de fluidodinâmica computacional (CFD) para avaliar a extensão e o volume da área classificada. Embora seja uma ferramenta confiável podendo ser utilizada como alternativa aos experimentos reais, no caso desses não poderem ser realizados, sua aplicação em qualquer

área de especialização requer uma boa quantidade de conhecimento e experiência com a ferramenta e os fenômenos sob investigação. Ademais, alguns cenários podem consumir muito tempo e conseqüentemente possuem considerável custo computacional. Nesse sentido, este trabalho permite uma melhor compreensão sobre o tema e disponibiliza modelos aperfeiçoados, possibilitando o uso de ferramentas com linguagens mais simplificadas.

Capítulo 3

Conceitos Fundamentais

A classificação de áreas se tornou uma ferramenta importante para proteger as pessoas, o meio ambiente e as comunidades. É de fundamental importância entendê-la e aplicá-la em instalações industriais (ex.: plantas de processamento *onshore* e *offshore* para a indústria de petróleo e gás, minas subterrâneas de carvão e refinarias de petróleo) para que se possa implementar medidas e técnicas afim de controlar o risco de explosão (WRIGHT-JANOCHA, 2015).

A classificação de área é a chave para manter a segurança e entender os perigos potenciais. No processo, os especialistas avaliam e classificam os locais de trabalho que podem vir a apresentar atmosferas de gás explosivo, permitindo-lhes determinar o melhor equipamento para selecionar, instalar e usar com segurança dentro da instalação. Este processo, que também cria uma estrutura para a preparação do procedimento de segurança, desempenha um papel importante para ajudar a minimizar os níveis de risco. A classificação diz respeito a áreas internas e externas ao equipamento de processo e está intimamente relacionada aos fenômenos de liberação e dispersão (WRIGHT-JANOCHA, 2015).

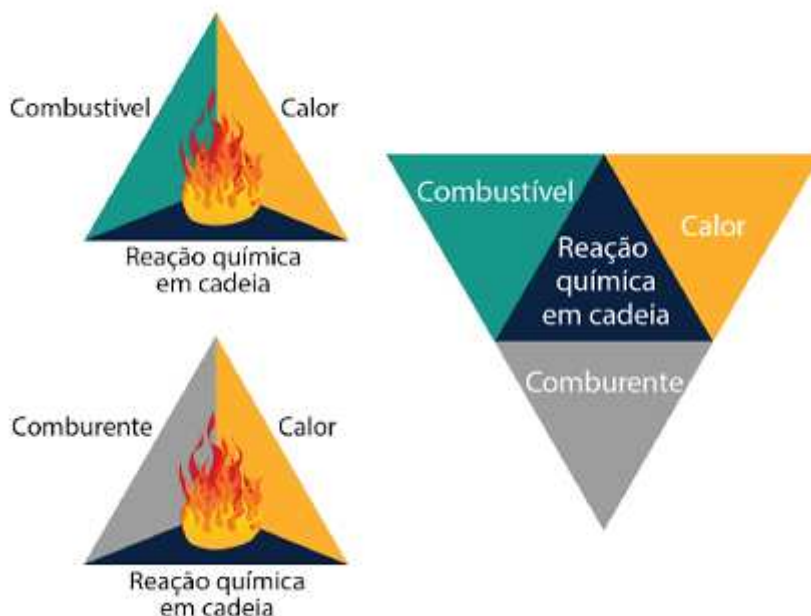
São indicados a seguir os principais termos e definições relacionados com a classificação de áreas em atmosferas explosivas, de acordo com as Normas da Série ABNT NBR IEC 60079 e ABNT NBR ISO/IEC 80079. Outros termos e definições sobre atmosferas explosivas são indicados na Norma ABNT NBR IEC 60050-426.

3.1 Limites de Inflamabilidade

A razão básica para a ocorrência de explosões é a presença da fonte de ignição em uma atmosfera onde o combustível e o oxidante já foram pré-misturados. Quando ocorre a reação em cadeia desses três elementos tem-se o tetraedro do fogo (Figura 3.1) o qual funciona como um guia qualitativo para prevenir incêndios e explosões. A remoção de qualquer um dos três

elementos críticos tornam um desses fatores impossível (BOTTRILL, CHEYNE e VIJAYARAGHAVAN, 2005; KUPHALDT, 2018).

Figura 3.1 - Tetraedro do Fogo.



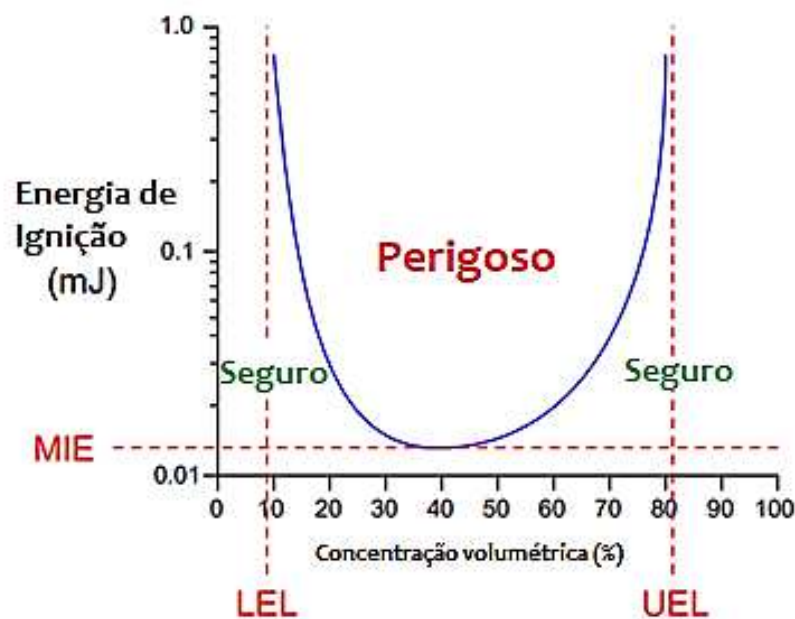
Fonte: Rotondo (2019).

O tetraedro do fogo mostra que, para a ocorrência de uma ignição ou explosão, é necessária a existência simultânea de um comburente (normalmente o oxigênio presente na atmosfera), do combustível (proveniente do processamento de substâncias explosivas, tais como gases inflamáveis ou poeiras combustíveis) e de fonte ignição (representada por centelhas, faíscas ou pontos aquecidos, normalmente encontrados em equipamentos industriais elétricos e mecânicos) em uma mistura que possa ocasionar a ignição da atmosfera explosiva. No entanto, para que a combustão de fato ocorra certos critérios básicos devem ser satisfeitos: uma relação oxidante/combustível adequada, energia suficiente para a ignição, e o potencial para uma reação química autossustentável (ou seja, a ausência de quaisquer inibidores químicos) (BULGARELLI, 2018; BOTTRILL, CHEYNE e VIJAYARAGHAVAN, 2005).

Todas as condições necessárias para uma explosão (assumindo que nenhum inibidor químico esteja presente) podem ser quantificadas e traçadas como uma curva de ignição para qualquer combinação particular de combustível e oxidante. A Figura 3.2 mostra a relação entre a energia de ignição e o nível de concentração de um gás combustível hipotético misturado com ar.

Observa-se que qualquer ponto no gráfico acima da curva é considerado perigoso, enquanto qualquer ponto abaixo da curva é considerado seguro. Os três valores críticos neste gráfico são o Limite Inferior de Inflamabilidade (LII), o Limite Superior de Inflamabilidade (LSI) e a Energia Mínima de Ignição (do inglês *Minimum Ignition Energy* - MIE). Esses valores críticos diferem para cada tipo de combinação de combustível e oxidante, mudam com a temperatura e pressão ambiente, e podem se tornar irrelevantes na presença de um catalisador (BOTTRILL, CHEYNE e VIJAYARAGHAVAN, 2005).

Figura 3.2 - Curva de Ignição.



Fonte: Adaptado de Kuphaldt (2019).

A partir do gráfico, verifica-se que para uma determinada concentração a mistura é facilmente inflamável e a ignição ocorre com energia mínima. Conforme a concentração se aproxima dos limites, a energia para ignição aumenta. Dessa forma, a mistura é considerada explosiva quando sua concentração estiver dentro da faixa delimitada pelos limites de inflamabilidade (MAGISON, 1998).

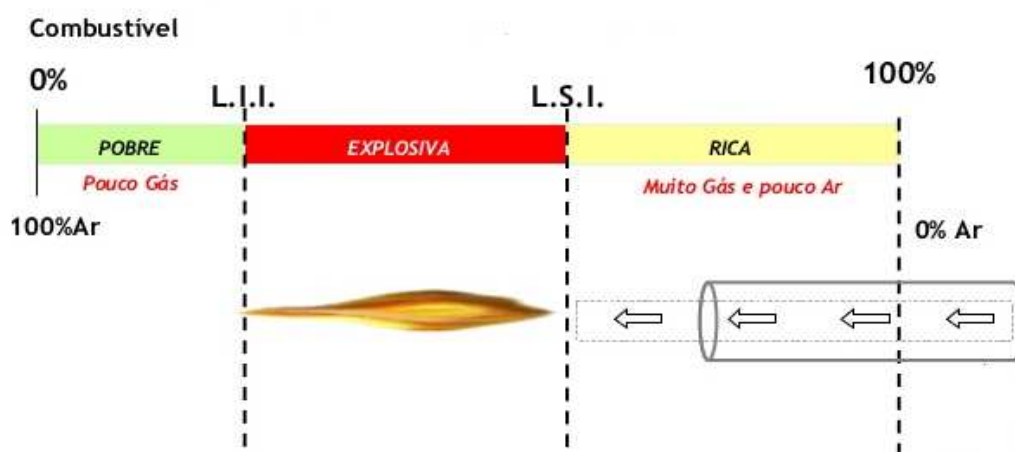
Define-se, portanto, os limites de inflamabilidade como sendo o intervalo de concentração de vapor ou gás combustível em uma mistura com o ar (geralmente expressa em porcentagem por volume) definindo a faixa de concentração (faixa inflamável ou explosiva), sobre a qual a propagação da chama ocorrerá em contato com uma fonte de ignição. (KUPHALDT, 2018).

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

Ainda de acordo com a NBR IEC 60079-10-1 (2009), o Limite Inferior de Inflamabilidade é a concentração de gás ou vapor inflamável no ar, abaixo da qual a atmosfera de gás não é explosiva e a mistura é considerada pobre, não permitindo a combustão ou explosão. O LII é um parâmetro importante para a determinação dos limites da zona de risco. A Figura 3.3 apresenta um esquema apontando, de uma forma geral, a faixa de inflamabilidade na qual uma explosão pode ocorrer.

As substâncias que possuem faixas de inflamabilidade amplas apresentam maior risco quando comparadas com outras que possuem faixas de inflamabilidade menores, pois, no caso de liberação para a atmosfera, o tempo de permanência com mistura inflamável será tanto maior quanto maior for a faixa de inflamabilidade da substância, considerando-se as mesmas condições de liberação em ambos os casos. A Tabela 3.1 apresenta os limites de inflamabilidade para algumas substâncias (JORDÃO e FRANCO, 2002).

Figura 3.3 - Faixa de Inflamabilidade.



Fonte: Anjos (2017).

Tabela 3.1 - Limites de inflamabilidade para determinadas substâncias.

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

3.2 Atmosferas Explosivas

Os riscos de explosão podem surgir em qualquer empresa onde sejam manuseadas substâncias inflamáveis. Isso inclui muitas matérias-primas, produtos intermediários, produtos acabados e resíduos de processos de trabalho diários. O risco de formação de uma atmosfera explosiva existe nos processos e procedimentos de trabalho mais diversos, razão pela qual afeta quase todos os ramos de atividade (IBARS e TORRENT, 2005).

De acordo com Jespen (2016) e em conformidade com as Normas IEC 60079-10-1 (2015) e PETROBRAS N-2918 (2017), uma atmosfera explosiva é definida como uma mistura com o ar, em condições atmosféricas, de substâncias inflamáveis na forma de gases, vapores, névoas ou poeiras em que, após a ocorrência da ignição, a combustão se espalha para toda a mistura não queimada (propagação autossustentada).

Define-se como substâncias inflamáveis aquelas que podem formar uma atmosfera explosiva. A definição de substância inflamável muda dependendo se a substância é um líquido, gás ou poeira.

- De acordo com a Norma PETROBRAS N-2918, Líquido inflamável refere-se a um produto químico líquido capaz de produzir vapor inflamável sob quaisquer condições de operações previstas (ex.: condição na qual o líquido inflamável é processado a temperaturas próximas ou acima do seu ponto de fulgor). Exemplos de líquidos

inflamáveis incluem solventes, combustíveis, petróleo, óleos lubrificantes ou resíduos e vernizes.

- Gás ou vapor inflamável é aquele que quando misturado com o ar, em determinadas proporções, formam uma atmosfera explosiva de gás ou vapor. Os gases inflamáveis incluem gases liquefeitos, como butano ou propano, gases naturais e gases de combustão, como monóxido de carbono ou metano.
- Poeira inflamável refere-se à poeira de sólidos inflamáveis, como carvão, madeira, alumínio, açúcar, farinha ou cereais. Para que a poeira cause uma atmosfera inflamável, ela deve ser fina o suficiente.

3.3 Classificação de Áreas

A classificação da área de risco deve ser realizada como parte integrante da avaliação de risco para identificar áreas onde os controles sobre as fontes de ignição são necessários (locais perigosos), chamadas de áreas classificadas, e também aqueles locais onde eles não são (locais não perigosos).

Segundo a Norma IEC 60079-10-1 (2015), área classificada é aquela na qual uma atmosfera explosiva está presente, ou pode estar presente em quantidades tais que necessitem de precauções especiais para projeto, fabricação, instalação, utilização, inspeção e manutenção de equipamentos. São geradas pelas fontes de risco.

Segundo Schram (1993), áreas classificadas podem ser definidas como locais, áreas ou espaços onde existe o perigo (ou a possibilidade) de fogo ou explosão devido à presença de gases ou vapores, líquidos, poeiras combustíveis ou fibras inflamáveis em suspensão.

Classificar uma área, para Jordão (2002), significa elaborar uma planta arquitetônica ou segundo o próprio, “um mapa”, com o objetivo principal de identificar o volume de risco dentro do qual é provável ocorrer uma mistura inflamável. Com base nesta planta, outras ações terão que ser tomadas para aumentar a segurança das instalações. Para Bahadori (2013), a classificação de área é um método de analisar e classificar o meio ambiente onde a atmosfera de gás explosivo pode ocorrer. Desta maneira, a partir do resultado da classificação de área, é possível estabelecer os requisitos construtivos dos equipamentos elétricos, comumente denominados de *Equipment Protection Level* (EPL), que estarão dentro dessa região, tornando-os aptos para operar nessa circunstância.

Existem várias normas e recomendações internacionais que estabelecem as regras de engenharia e segurança nas instalações elétricas em áreas com a presença de atmosferas

explosivas, como a IEC 60079-10 e a americana API RP 505. No Brasil, as normas pertencem à série ABNT NBR IEC 60079.

3.3.1 Critérios de Classificação de Áreas

No mundo, diversos organismos internacionais utilizam códigos e padrões diferentes, no entanto, qualquer que seja o esquema, todos cobrem a classificação de risco e os métodos de proteção que podem ser usados para prevenir explosões nessas áreas. Atualmente existem dois sistemas de classificação de áreas perigosas:

- i. **Sistema de classificação de divisão** – adotado em alguns lugares da América do Norte onde a NFPA (*National Fire Protection Association*) é a principal agência para a proteção de instalações contra incêndio e explosão;
- ii. **Sistema de classificação de zona** – adotado mais amplamente em todo o mundo que utiliza os padrões de áreas perigosas definidos pela IEC (*International Electrical Commission*).

No sistema de “zona”, os perigos são definidos para gás como zona 0, 1 ou 2, com 0 como o perigo mais alto, e para poeira como zona 20, 21 ou 22, com 20 como o perigo mais alto. O Quadro 3.1 apresenta a definição de cada zona.

Quadro 3.1 - Definição das zonas de risco.

Material presente	Zona	Definição
Gases e vapores	0	Área na qual uma atmosfera gasosa explosiva está presente continuamente, ou está presente por longos períodos.
	1	Área na qual uma atmosfera gasosa explosiva tem probabilidade de ocorrer em operação normal.
	2	Área na qual uma atmosfera gasosa explosiva não é provável ocorrer em operação normal, porém se ocorrer, será por um período curto.
Poeiras e fibras	20	Local onde a atmosfera explosiva, em forma de nuvem de poeira, está presente continuamente, por longos períodos de tempo em quantidade suficiente para oferecerem risco de formação de atmosfera explosiva.

	21	Local onde as poeiras ou fibras combustíveis são prováveis de ocorrer ocasionalmente, em condições normais de operação, em quantidade suficiente para oferecerem risco de formação de atmosfera explosiva.
	22	Local onde a atmosfera explosiva, em forma de nuvem de poeira, existirá somente em condições anormais de operação e, se existir, será somente por curto período de tempo.

Fonte: Neto (2010), Fudoli (2012) e Soares *et al.* (2015).

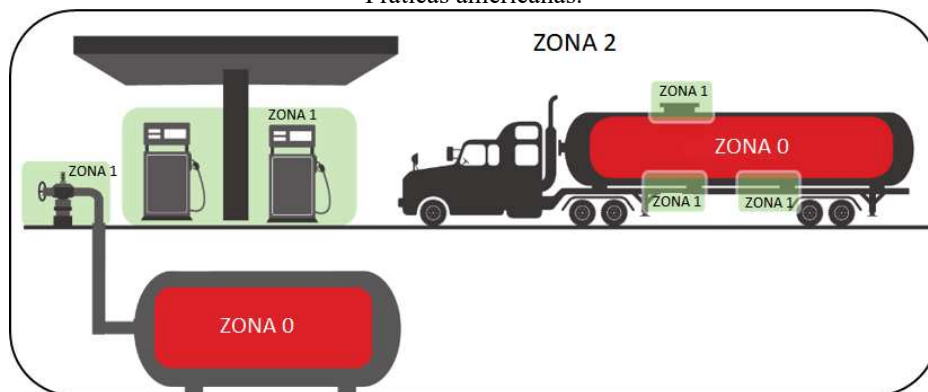
Sob o sistema de “Divisão”, os perigos são definidos para gás como Classe I, para poeiras como Classe II e para fibras como Classe III, todos com Divisão 1 ou 2 sendo a 1 como o risco mais alto. O conceito de divisão é definido no Quadro 3.2. A Figura 3.4 mostra a classificação de área em torno de um tanque de acordo com as duas práticas mencionadas anteriormente. A Figura 3.4 mostra um exemplo de classificação de área segundo a norma IEC e de acordo com as práticas americanas.

Quadro 3.2 - Definição de Divisão para atmosfera explosiva.

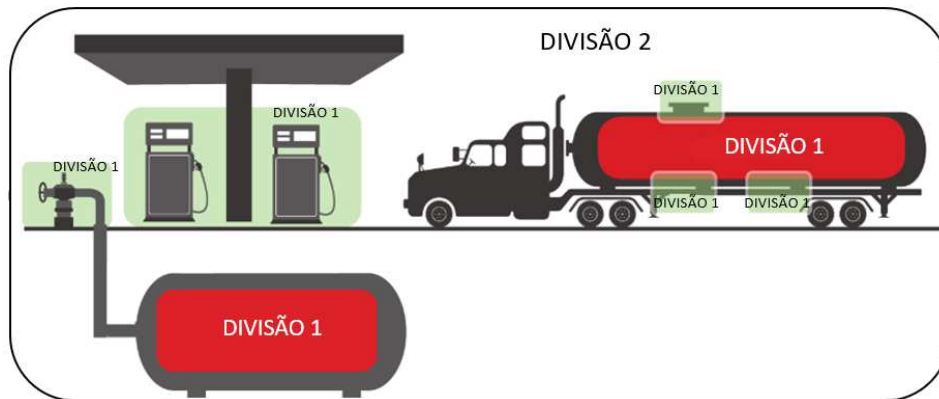
Divisão	Definição
1	Locais com alta probabilidade de presença de mistura inflamável, de forma contínua, intermitente ou periódica em condições normais de operação.
2	Locais com baixa probabilidade de presença de mistura inflamável por operação com falha incomum em condições de operação anormais.

Fonte: Jordão (2002) e Patil (2020).

Figura 3.4 - Classificação de área em torno de um tanque de acordo com: (a) Norma internacional IEC; (b) Práticas americanas.



(a)



(b)

Fonte: Adaptado de NJZ Lighting (2016).

A classificação de Zonas e Divisões está relacionada à frequência e duração em que gases ou poeiras inflamáveis podem estar presentes na atmosfera. Várias fontes tentaram colocar limites de tempo para essas zonas, mas os valores mais comuns utilizados são (HSE, 2018):

- **Zona 0/20:** Atmosfera explosiva por mais de 1000 horas/ano.
- **Zona 1/21:** Atmosfera explosiva por mais de 10, mas menos de 1000 horas/ano.
- **Zona 2/22:** Atmosfera explosiva por menos de 10 horas/ano.
- **Classe I e II Divisão 1:** Atmosfera explosiva por mais de 10 horas/ano
- **Classe I e II Divisão 2:** Atmosfera explosiva por menos de 10 horas/ano

3.4 Fontes de Risco

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

Se for estabelecido que o equipamento possa liberar material inflamável para a atmosfera, é necessário, em primeiro lugar, determinar o grau de risco de liberação de acordo com as definições, estabelecendo a frequência e a duração da liberação. Deve ser reconhecido

que a abertura de partes de sistemas de processo fechados deve também ser considerada fonte de risco quando da elaboração da classificação de áreas. Por meio deste procedimento, cada fonte de risco deve ser denominada como de grau contínuo, grau primário ou grau secundário conforme descrito a seguir (SOARES *et al.*, 2015; OTSUKA, 2011).

a) Fonte de risco de grau contínuo:

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

b) Fonte de risco de grau primário:

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

c) Fonte de risco de grau secundário:

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

Jordão (2002) apresenta uma relação entre a classificação da zona de risco e a fonte, cujo grau de risco pode ser determinado de acordo com o número de horas com presença de mistura inflamável por ano. Tal relação pode ser observada na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 - Classificação da zona de risco com relação ao grau da fonte de risco.

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

3.5 Extensão de Zonas

A norma IEC 60079-10-2 (2015) define a extensão de zonas como sendo a distância em qualquer direção a partir da borda de uma fonte de liberação até o ponto onde o perigo associado à liberação é considerado não existir mais. Em outros termos, Ezzat *et al.* (2018) define como sendo a distância a partir da fonte de liberação até o ponto onde o material é diluído abaixo de seu limite inferior de inflamabilidade.

De acordo com Bottrill *et al.* (2005), a extensão da zona é afetada principalmente por parâmetros químicos e físicos, alguns dos quais são propriedades intrínsecas do material inflamável e outros são específicos do processo. O efeito de cada parâmetro, listado abaixo, assume que os outros parâmetros permanecem inalterados.

- i. **Taxa de Liberação** – quanto maior for a taxa de liberação da substância inflamável, maior será a extensão da área classificada. Por sua vez, a taxa de liberação depende ainda de outros parâmetros tais como: a geometria da fonte, a velocidade, as condições de pressão e de temperatura, a concentração de gás e vapor e a volatilidade da substância inflamável.
- ii. **Limite Inferior de Inflamabilidade** – Para um dado volume liberado, quanto menor for o LII maior será a extensão da área classificada.
- iii. **Ventilação** - Com o aumento da ventilação, a extensão da área será reduzida. Obstáculos que impedem a ventilação podem aumentar a extensão, mas, por outro lado, alguns obstáculos (diques, paredes ou tetos) podem limitar a extensão.
- iv. **Densidade Relativa do gás ou vapor** - Se o gás ou vapor for mais leve que o ar, ele tenderá a se mover para cima, caso contrário (se for mais pesado), ele tenderá a se acumular no nível do solo. A extensão horizontal da zona ao nível do solo aumentará com o aumento da densidade relativa, e a extensão vertical acima da fonte de liberação aumentará com a diminuição da densidade relativa.

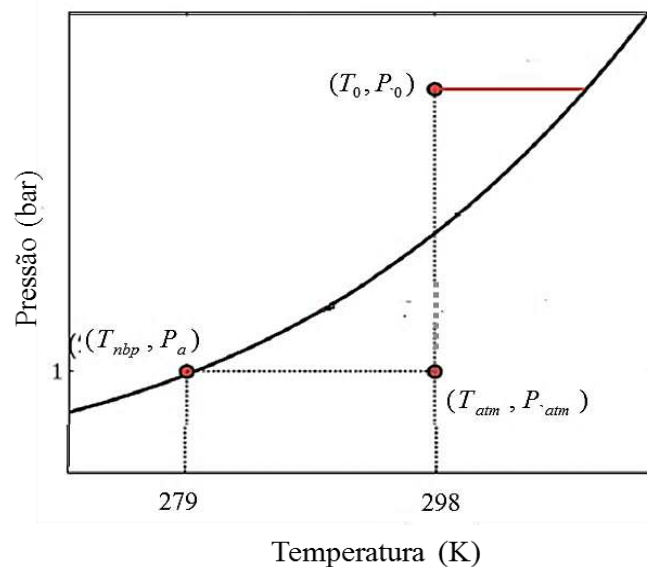
Bottrill *et al.* (2005) ainda aponta que as condições climáticas e a topografia do local também são parâmetros a serem considerados.

3.6 Liberações Bifásicas

A previsão do comportamento da substância a ser liberada pode ser feita através da análise de um diagrama de fases. Tal diagrama indica o estado da substância com a

determinação de duas propriedades, como pressão e temperatura. Entre as regiões ditas monofásicas encontram-se as regiões bifásicas, ou seja, condições onde duas fases podem coexistir em equilíbrio. A Figura 3.5 ilustra a linha de saturação para uma substância volátil hipotética em um diagrama pressão-temperatura no qual os pontos (T_0, P_0) , (T_{nbp}, P_a) e (T_{atm}, P_{atm}) correspondem as condições de armazenamento, o ponto normal de bolha e as condições atmosféricas, respectivamente. Em relação as condições de armazenamento, um líquido é caracterizado como sub-resfriado se a temperatura de armazenamento T_0 for inferior a temperatura de saturação na pressão de armazenamento P_0 , e como superaquecido se a temperatura T_0 for superior à temperatura de saturação em P_0 .

Figura 3.5 - Curva de saturação para uma substância química hipotética.

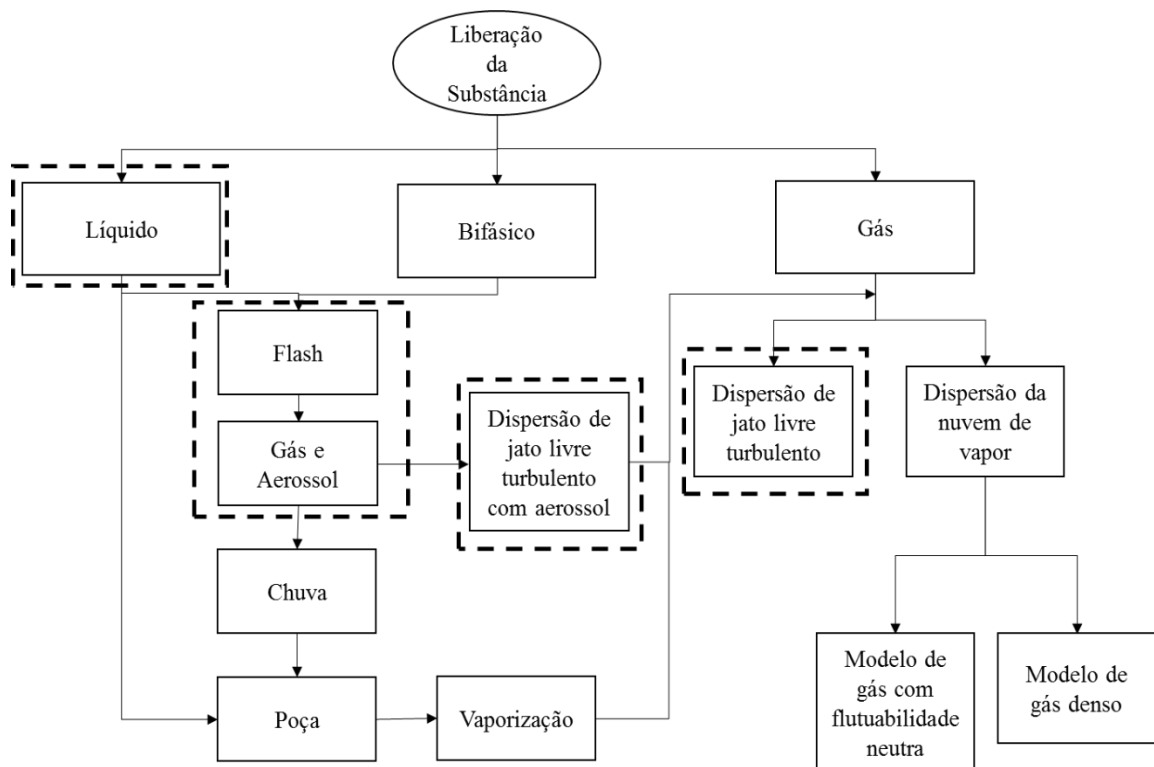


Fonte: Adaptado de Ichard (2012).

Os termos sub-resfriado ou superaquecido são também utilizados quando a temperatura do fluido é comparada com a temperatura de saturação (T_{sat}) à pressão ambiente (ponto normal de ebulição). Isto irá afetar o estado do material à medida que sai do recipiente de armazenamento. Na maioria das liberações que flasheiam, o líquido dentro do reservatório é sub-resfriado ou saturado com referência às condições de armazenamento (T_0, P_0) , onde T_0 é inferior ou equivalente a temperatura de saturação avaliada na pressão de armazenamento ($T_{sat}(P_0)$) ou P_0 é superior a pressão de saturação à T_0 , e superaquecido com referência às condições atmosféricas (T_{atm}, P_{atm}) , onde T_0 é superior a temperatura de saturação avaliada na pressão atmosférica ($T_{sat}(P_{atm})$) (HANNA, 2009; ICHARD, 2012).

Uma substância descarregada em uma situação de liberação acidental pode ser emitida e dispersa de diferentes formas, conforme pode ser verificado no diagrama simplificado da Figura 3.6. De acordo com Hanna (2009), o cenário de liberação irá depender das propriedades termodinâmicas, fluido mecânicas e de transporte da substância; da geometria de armazenamento; e do estado físico da substância (AICHE, 2000).

Figura 3.6 - Possíveis situações para emissão e dispersão da substância liberada.



Fonte: Adaptado de Aiche (2000).

Primeiro define-se o estado físico da liberação. Cenários de liberações típicos envolvem a emissão de gases, líquidos ou misturas bifásicas. Nos casos de vazamentos com presença de fase líquida será necessário verificar se ocorre evaporação, fenômeno denominado de *flash*, e consequente formação de um jato de vapor carregado de gotículas (aerossol). Caso esse fenômeno não ocorra, deve-se escolher um modelo de origem adequado para mistura bifásica ou para líquido que não evapora durante o processo de liberação (MCMILLAN, 1998). Caso o fenômeno ocorra, o modelo de origem deve descrever o processo de evaporação. Particularmente, a presença de gotículas pode gerar uma poça a partir do fenômeno conhecido como *rainout*. Para esta situação será necessário um modelo de formação e evaporação dessa poça (RAJ e KALELKAR, 1974; modelo Phast de WITLOX *et al.*, 2010; BRAMBILLA e MANCA, 2009). O vazamento de um líquido que não evapora, também formará a poça. Se a

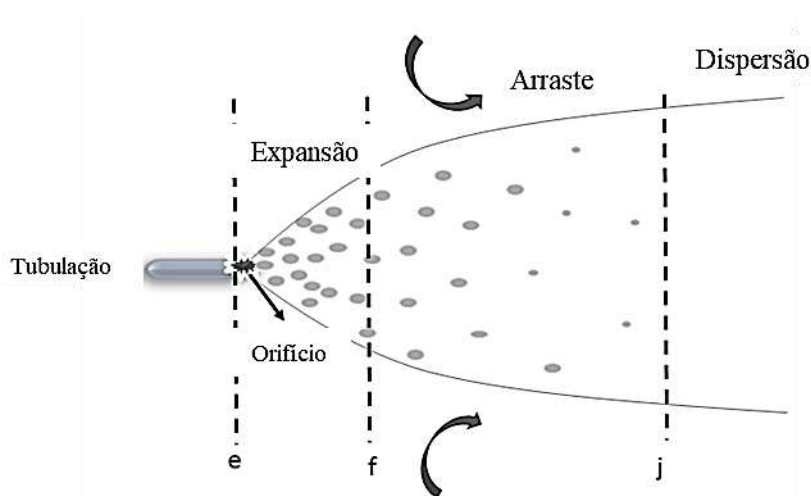
chuva não ocorre, implica dizer que todas as gotas evaporaram antes ou assim que chegam ao solo e então um modelo de transporte e evaporação do aerossol deve ser utilizado (PAPADOURAKIS *et al.*, 1991; WOODWARD e PAPADOURAKIS, 1991).

Todos os tipos de liberação resultarão na formação e dispersão de uma nuvem de vapor para a qual o tipo de modelo a ser aplicado irá depender, dentre outros fatores, da densidade relativa do gás. Dessa forma, podem ser empregados modelos de dispersão para gases densos, neutros ou leves, a depender das propriedades da nuvem. Esta pode ainda ter o comportamento de um jato turbulento livre cuja dispersão irá requerer um modelo que melhor o descreva.

Neste trabalho, as condições de aplicação da metodologia proposta representam o caminho em destaque na Figura 3.6, ou seja, o componente liberado em seu estado líquido sofre uma evaporação parcial dando origem a um jato bifásico cuja configuração é esquematizada na Figure 3.7.

Suponha que um gás liquefeito contido em um volume de controle seja descarregado através de um orifício de pequeno diâmetro. O líquido que escapa é submetido a uma diminuição repentina da pressão resultando na formação de um jato de vapor carregado de gotículas. Com base em estudos anteriores (FAUSK e EPSTEIN, 1988; JOHNSON e DIENER, 1991; FTHENAKIS, 1993; POLANCO, 2008 e CALAY e HOLDO, 2008), a configuração desta liberação depende basicamente das condições do jato na saída do orifício (ponto “e”), no final da região de expansão (ponto “f”), e após a evaporação total das gotículas (ponto “j”).

Figura 3.7 - Representação esquemática do jato bifásico.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Na região de expansão, o gás liquefeito se expande à medida que a pressão diminui. Quando a pressão atinge um valor inferior à pressão de saturação do líquido parte dele evapora

e parte pode ser atomizado em gotas finas de acordo com três diferentes mecanismos definidos na próxima subseção: *capillary break-up*; *aerodynamic break-up*; *flash break up*. Esses mecanismos resultam em uma mistura bifásica composta de vapor e gotículas líquidas (aerossol) de vários tamanhos e velocidades, que são projetadas em diferentes direções no ar. A expansão se dá até o momento em que a pressão interna do jato se torna equivalente à pressão ambiente.

À medida que a mistura de gotículas líquidas e vapor se afasta do ponto de liberação, ela arrasta o ar ambiente, diluindo o jato. Neste contato (gotas líquidas e ar), haverá transporte de energia, devido ao gradiente de temperatura, provocando a evaporação das gotículas que se encontram a uma temperatura inferior a ambiente, e conseqüente transporte de massa. O efeito desta diluição com ar é aumentar a evaporação e por conseguinte arrefecer o ar arrastado. Qualquer resfriamento que ocorra também pode resultar na condensação da umidade do ar ambiente.

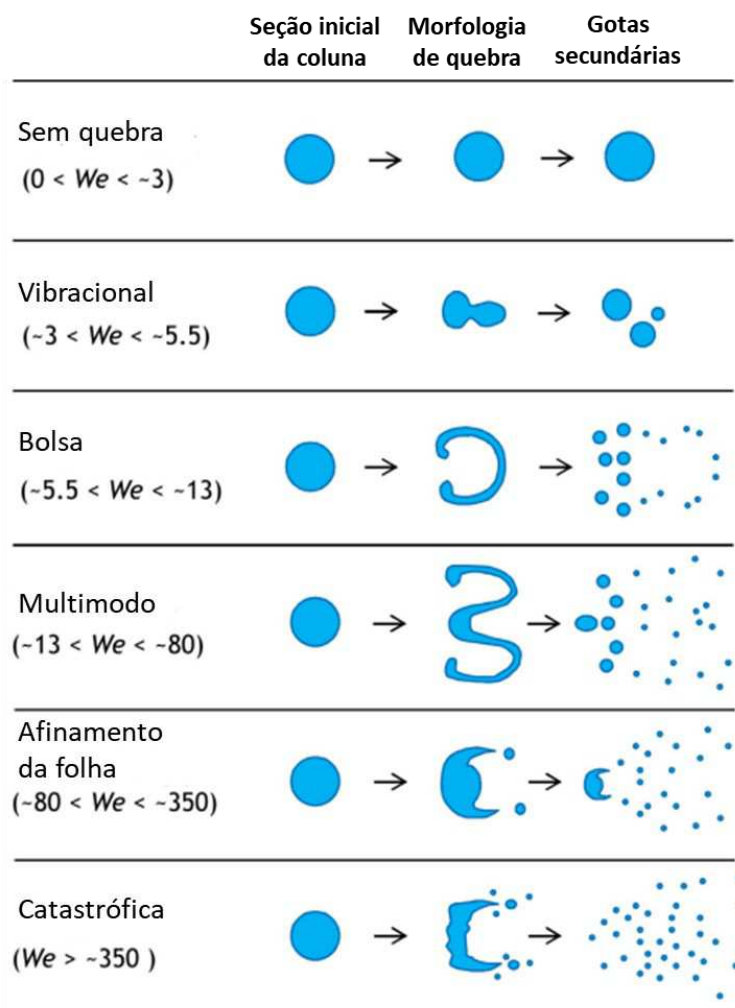
Gotículas que evaporam apenas parcialmente, eventualmente atingirão o chão (*rainout*) e formarão uma poça líquida. Essa evaporação é limitada pelos processos de troca de massa de energia com o gás no qual a partícula se dispersa. Entende-se como gás, a mistura de vapor do componente com o ar arrastado para o jato. As gotículas que não caírem no chão continuam a evaporar e diminuem de tamanho até que finalmente, desaparecem completamente formando uma nuvem de vapor que se dispersará para o meio ambiente (região de dispersão) (WITLOX *et al.*, 2010).

3.6.1 Mecanismos de Quebra da Gota

Gotículas podem ser formadas por uma descarga pressurizada de líquidos sub-resfriados ou superaquecidos. O processo de formação das primeiras gotículas é conhecido como separação primária. Essas gotas são então sujeitas à uma ruptura secundária, isto é, novas partículas são formadas a partir do colapso das anteriores, devido a altas velocidades relativas entre a interface gás / líquido (RIBEIRO, 2016).

O número de Weber é o parâmetro relevante para o mecanismo de quebra de uma gota líquida. Este número é uma relação entre a força aerodinâmica, que tende a quebrar as gotas em partículas menores, e a força de tensão superficial, que por outro lado tenta manter as gotas em sua forma esférica. Segundo Chen *et al.* (2016), conforme o número de Weber é aumentado, diferentes morfologias de quebra de gotículas começam a aparecer (Figura 3.8).

Figura 3.8 - Regimes de Quebra de Partículas.



Fonte: Adaptado de Chen *et al.* (2018)

As gotas secundárias resultantes da quebra primária, como mencionado anteriormente, podem sofrer três mecanismos de quebra em gotas mais finas. *Capillary break-up* ocorre em jatos com baixa velocidade que se originam de orifícios de diâmetros pequenos, segundo Woodward (1998) citado em Benintendi (2021) este diâmetro é da ordem de 2 mm, provocando instabilidades na superfície do jato. A ruptura aerodinâmica (*aerodynamic break-up*) ocorre por quebra mecânica e mecanismos de descamação com orifícios maiores a partir de líquidos sub-resfriados ou líquidos ligeiramente superaquecidos. *Flashing break-up* ocorre quando líquidos superaquecidos são descarregados e parte do líquido se transforma em vapor na forma de bolhas que crescem rapidamente e quebram o líquido circundante.

Na literatura existem diversos modelos para definir o tamanho das gotas resultantes desses mecanismos. Nesse estudo, foram considerados para avaliação quatro diferentes modelos os quais são definidos no próximo capítulo.

3.6.2 Rainout

A massa inflamável em uma nuvem de aerossol é diminuída pela chuva de gotículas de líquido. Segundo Woodward (1998), o efeito da chuva é diminuir a força da fonte da nuvem de vapor original e prolongar o evento, desenvolvendo uma poça de líquido que continua a evaporar. Sendo assim, o *rainout* pode ajudar a reduzir as concentrações na nuvem de vapor resultante. No entanto, a evaporação da poça pode aumentar a extensão da área classificada e, de acordo com Lacombe et al. (2012), este fenômeno pode ainda ser mais acentuado se o jato bifásico atingir um obstáculo.

Uma série de correlações práticas foram propostas para fornecer estimativas da fração de *rainout*. A consideração mais comum é limitar a evaporação das gotas à um diâmetro máximo calculado. Nessa situação, a chuva só ocorrerá se o tamanho da gota após o *flashing* for maior que o diâmetro crítico calculado. Nesse trabalho, a ocorrência de *rainout* é avaliado por meio da solução de equações diferenciais ordinárias que descrevem o momento, a transferência de calor e massa de / para a superfície e a posição da gota (trajetórias).

Capítulo 4

Modelagem

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

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

Nesse sentido, este capítulo descreve a modelagem utilizada para fins de avaliação de áreas classificadas com atmosferas explosivas. Utilizou-se como ferramenta de simulação e avaliação dos casos testados, o software Matlab®.

A modelagem inicial é dividida em dois pontos: liberação e pós expansão (pontos “e” e “f” da Figura 3.7). No orifício, as principais variáveis a serem definidas são: fluxo mássico, velocidade de liberação e fração de vapor. Após o jato atingir a pressão ambiente e, portanto, parar de expandir, os elementos a serem definidos são: velocidade, área expandida, fração de vapor e diâmetro médio da partícula (SMD). Em seguida, avalia-se a dinâmica e vaporização das gotículas formadas, bem como os fenômenos de troca de massa, momento e energia devido às interações com o gás (vapor do componente + ar). A modelagem da poça não foi tratada até a elaboração desse material, prever-se apenas a ocorrência de chuva. Finalmente, a modelagem da linha central do jato e da extensão da área classificada é descrita.

As correlações utilizadas para o cálculo de propriedades específicas podem ser consultadas no Apêndice A e os parâmetros utilizados se encontram no Apêndice B. A exemplo

dessas propriedades, pode-se citar: capacidade calorífica, calor latente de vaporização, densidade, viscosidade dinâmica, condutividade térmica, tensão superficial e pressão de saturação. Utilizou-se como referência o material de ajuda do Aspen Plus V8.8, o Handbook de Green e Perry (2008) e Poling *et al.* (2001).

Será abordada apenas a modelagem da região bifásica uma vez que ela é também aplicada a região monofásica, considerando que todas as gotas evaporaram. Assim, os termos referentes a fase líquida não estão presentes e a quantidade de vapor não varia.

4.1 Estimativa das Variáveis no Orifício de Liberação

Antes de calcular o fluxo de liberação é necessário definir qual a condição de liberação, ou seja, a temperatura e pressão no orifício. Nesse sentido, um método bem conhecido é o método Ômega que além de determinar o estado da liberação, também define o fluxo mássico.

Esse método é uma forma do Modelo de Equilíbrio Homogêneo que pode ser aplicado a fluxos *choked* e *non-choked*, sistemas *flashing* e *non-flashing* e sua aplicabilidade foi estendida a condições iniciais de sub-resfriamento. Uma vantagem é o cálculo direto, sem etapas iterativas e que apenas um conjunto de dados de propriedade na condição de liberação é obrigatório. Desenvolvido inicialmente por Leung (1996), foi revisado e modificado por outros autores e é recomendado por padrões conhecidos, como API 520 (2013). Aqui, uma explicação resumida do método é fornecida (ARNULFO *et al.*, 2014).

Leung distingue quatro estados iniciais da substância armazenada como líquido na forma de gás pressurizado:

- i. Líquido saturado;
- ii. Bifásico;
- iii. Líquido sub-resfriado.
 - (a) Alto sub-resfriamento;
 - (b) Baixo sub-resfriamento.

O modelo de Leung calcula um parâmetro ω (Equação 4.1) utilizando como base dados de volume específico obtido a partir de uma equação geral de estado.

$$\omega = \phi_{v,s} \frac{v_{lg,s}}{v_s} + \frac{Cp_{l,s} \cdot T_s \cdot P_s}{v_s} \left(\frac{v_{lg,s}}{L_{v,s}} \right)^2 \quad (4.1)$$

onde $\phi_{v,s}$ é a fração mássica de vapor no armazenamento, $v_{lg,s}$ é o volume específico (diferença entre a fase vapor e líquida), v_s é o volume específico da mistura, $Cp_{l,s}$ é o calor específico da fase líquida, T_s e P_s a temperatura e pressão de armazenamento e $L_{v,s}$ o calor latente à T_s ;

Considerando uma liberação acidental, se a pressão de armazenamento se mantém constante e reduz-se a pressão no orifício, um pouco de cada vez, isso irá resultar em um aumento do fluxo mássico. No entanto, haverá um valor limite de pressão para o qual nenhum aumento adicional no fluxo será observado. O fluxo resultante é chamado de crítico, bem como a pressão neste ponto. Dessa forma, o modelo de Leung determina o fluxo, pressão e razão críticos.

Abaixo, a Figura 4.1 exibe o fluxograma de aplicação do método utilizado neste trabalho para obtenção da condição de liberação. O modelo utilizado para um armazenamento bifásico é o mesmo aplicado a líquido saturado. O Quadro 4.1 resume todas as equações do método ômega.

O fluxo crítico obtido pelo referente método depende do estado em que o líquido armazenado se encontra. Fauske e Epstein (1988) sugerem que, para condições de sub-resfriamento, o fluxo no orifício pode ser obtido com base na equação de Bernoulli que, de acordo com Bosch *et al.* (2005), pode ser adaptado a liberações bifásicas. Nesse caso, o fluxo depende da densidade no orifício, conforme mostra a Equação 4.16, que por sua vez, depende da fração de vapor no orifício.

$$G_c = \sqrt{2\rho_e(P_s - P_e)} \quad (4.16)$$

Onde,

$\phi_{v,e}$ = Fração mássica de vapor no vazamento;

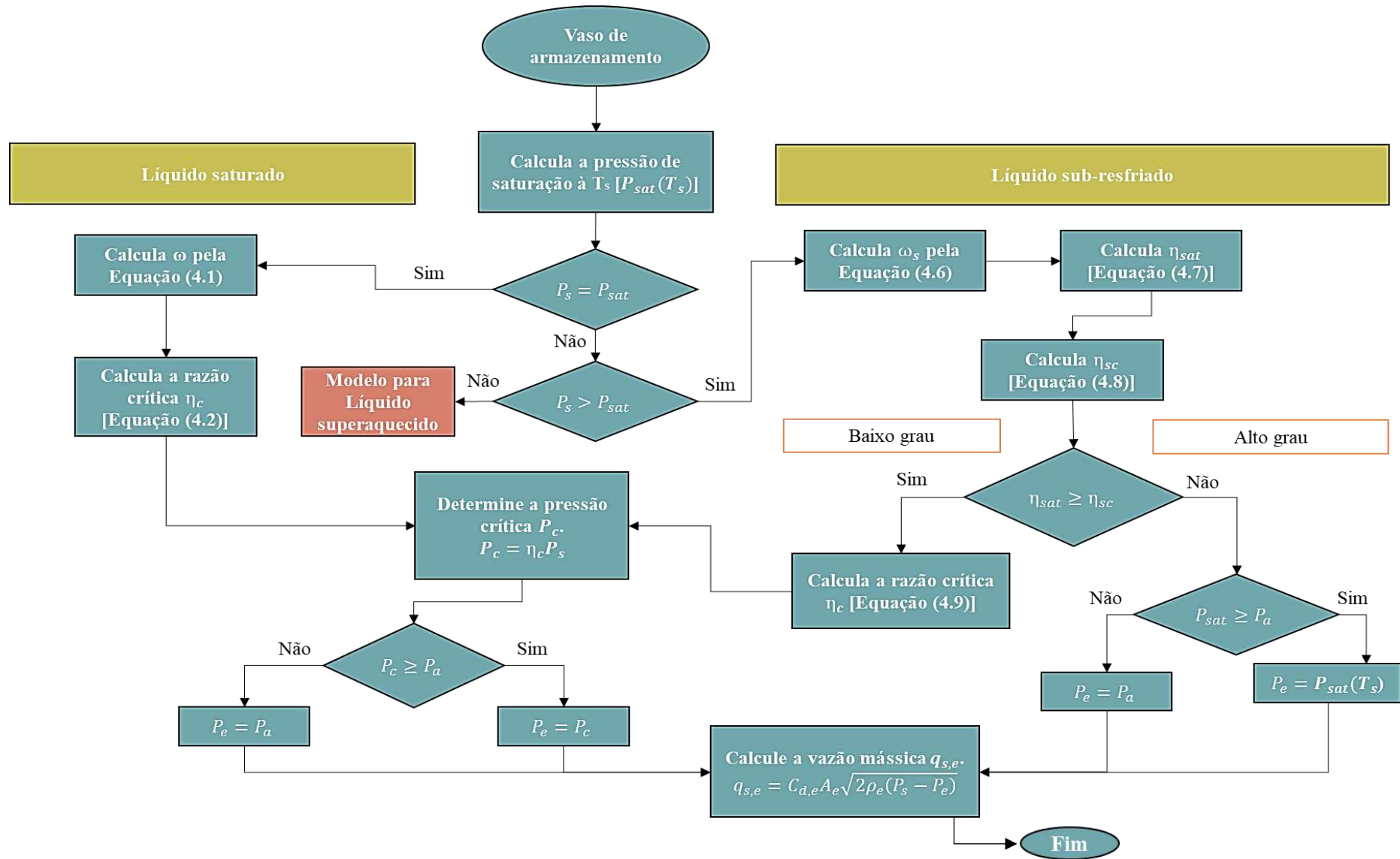
ρ_e = Densidade da mistura bifásica no vazamento $\left(\rho_e = \frac{1}{\frac{(1-\phi_{v,e})}{\rho_{l,e}} + \frac{\phi_{v,e}}{\rho_{v,e}}} \right)$;

$\rho_{l,e}$ = Densidade da fase líquida;

$\rho_{v,e}$ = Densidade da fase vapor;

P_e = Pressão no orifício de liberação;

Figura 4.1 - Fluxograma de obtenção das condições de liberação



Quadro 4.1 - Equações do modelo de Leung.

Estado	Equação
Líquido saturado	$\eta_c^2 + (\omega^2 - 2\omega)(1 - \eta_c)^2 + 2\omega^2 \ln \eta_c + 2\omega^2 (1 - \eta_c) = 0 \quad (4.2)$
	$G_c = \eta_c \sqrt{\frac{P_s \rho_s}{\omega}} \quad (\text{fluxo crítico}) \quad (4.3)$
	$G_c = \frac{\sqrt{P_s \rho_s}}{\omega \left(\frac{1}{\eta_a} - 1 \right) + 1} \sqrt{-2[\omega \ln \eta_a + (\omega - 1)(1 - \eta_a)]} \quad (\text{fluxo subcrítico}) \quad (4.4)$
	$\eta_a = \eta_c = \frac{P_a}{P_s} \quad (4.5)$
Líquido sub-resfriado	$\omega_s = \frac{C p_{l,s} \cdot T_s \cdot P_{sat}(T_s)}{v_s} \left(\frac{v_{lg,s}}{L_{v,s}} \right)^2 \quad (4.6)$
	$\eta_{sat} = \frac{P_{sat}(T_s)}{P_s} \quad (4.7)$
	$\eta_{sc} = \frac{2\omega_s}{1 + 2\omega_s} \quad (4.8)$
Baixo grau	$\eta_c = \eta_{sat} \left(\frac{2\omega_s}{2\omega_s - 1} \right) \left[1 - \sqrt{1 - \frac{1}{\eta_{sat}} \left(\frac{2\omega_s - 1}{2\omega_s} \right)} \right] \quad (4.9)$
	$G_c = \frac{\sqrt{P_s \rho_{l,s}}}{\omega_s \left(\frac{\eta_{sat}}{\eta} - 1 \right) + 1} \sqrt{2(1 - \eta_{sat}) + 2 \left[\omega_s \eta_{sat} \ln \left(\frac{\eta_{sat}}{\eta} \right) - (\omega_s - 1)(\eta_{sat} - \eta) \right]} \quad (4.10)$
	$\eta = \eta_a = \frac{P_a}{P_s} \quad (\text{fluxo subcrítico}) \quad (4.11)$
	$\eta = \eta_c \quad (\text{fluxo crítico}) \quad (4.12)$
Alto grau	$G_c = \sqrt{P_s \rho_{l,s}} \sqrt{2(1 - \eta)} \quad (4.13)$
	$\eta = \eta_a = \frac{P_a}{P_s} \quad (\text{fluxo subcrítico}) \quad (4.14)$
	$\eta = \eta_{sat} = \frac{P_{sat}(T_s)}{P_s} \quad (\text{fluxo crítico}) \quad (4.15)$

A quantidade de líquido que vaporiza após o vazamento pode ser obtida a partir de um balanço adiabático como descrito pela Equação 4.17.

$$\phi_{v,e} = \frac{Cp_l(T_s - T_e)}{L_{v,e}} \quad (4.17)$$

onde Cp_l , T_s , T_e e $L_{v,e}$ são a capacidade calorífica, temperatura do reservatório, temperatura de liberação e o calor latente de vaporização, respectivamente. Nos casos simulados, a temperatura de liberação é fornecida ou calculada considerando condição de saturação.

De forma a analisar qual equação melhor se ajustaria às situações experimentais, avaliou-se as duas estratégias para o cálculo do fluxo mencionadas anteriormente. A equação de Bernoulli apresentou melhorias no resultado sendo, portanto, a correlação adotada neste trabalho. Os resultados dessa avaliação são mostrados no capítulo 5.

A velocidade de vazamento é calculada a partir da Equação 4.18, considerando a definição de vazão mássica, para os casos em que a liberação é bifásica. Caso no orifício o componente ainda seja líquido, utiliza-se a equação de Bernoulli para a velocidade.

$$u_e = \frac{q_e}{\rho_e A_e} \quad (4.18)$$

onde q_e e A_e são a vazão mássica de liberação e a área do orifício, respectivamente. A área é calculada considerando uma seção transversal circular.

4.2 Estimativa das Variáveis de Expansão

O jato bifásico gerado expande até que sua pressão atinja a atmosférica. Para componentes puros, a temperatura neste ponto é igual a de saturação à pressão ambiente (P_a). Para o cálculo da velocidade (u_f), fração de vapor ($\phi_{v,f}$) e área de expansão (A_f), utiliza-se equações de conservação de momento, energia e massa, respectivamente, conforme as Equações 4.19, 4.20 e 4.21.

$$q_f u_f = q_e u_e + (P_e - P_a) A_e \quad (4.19)$$

$$q_f \left(H_f + \frac{1}{2} u_f^2 \right) = q_e \left(H_e + \frac{1}{2} u_e^2 \right) \quad (4.20)$$

$$\rho_f A_f u_f = \rho_e A_e u_e \quad (4.21)$$

Onde H_f , H_e são calculadas a partir das Equações 4.22 e 4.23.

$$H_f = \phi_{v,f} h_{v,f} + (1 - \phi_{v,f}) h_{l,f} \quad (4.22)$$

$$H_e = \phi_{v,e} h_{v,e} + (1 - \phi_{v,e}) h_{l,e} \quad (4.23)$$

$h_{v,f}$ e $h_{v,e}$ são as entalpias específicas da fase vapor, já $h_{l,f}$ e $h_{l,e}$ são as entalpias específicas da fase líquida. As propriedades são calculadas no ponto pós expansão (“f”) e no ponto de vazamento (“e”) (veja a Figura 3.7).

4.2.1 Diâmetro Médio da Gota

Uma variável importante que deve ser bem definida é o diâmetro médio da gota, uma vez que seu valor indica a extensão da região bifásica e a ocorrência de *rainout*. Neste trabalho foram avaliados quatro modelos disponíveis na literatura afim de verificar qual deles melhor representa os dados experimentais. Em todos os casos, a distribuição do diâmetro da gota é considerada uniforme.

4.2.1.1 Modelo Recomendado pelo CCPS

O modelo do CCPS (*Center for Chemical Process Safety*) é descrito em Johnson e Woodward (1999). Existem dois mecanismos principais para a atomização de líquido: ruptura mecânica e atomização *flashing*. O diâmetro representativo para gotas formadas pelo processo de quebra mecânica é denotado $d_{p,1}$ e é calculado com base na equação de Weber (Equação 4.24).

$$d_{p,1} = \frac{We_c \sigma_{l,f}}{\rho_a u_f^2} \quad (4.24)$$

onde ρ_a é a densidade do ar, $\sigma_{l,f}$ é a tensão superficial da fase líquida avaliada na temperatura de bolha (ponto “f”), e We_c é o número crítico de Weber.

Foi observado que a quebra da gota por forças aerodinâmicas ocorre quando o número de Weber atinge um valor crítico entre 10 e 20 (CLIFT *et al.*, 2005). Johnson e Woodward (1999) consideram o valor base de 10 para o número crítico de Weber. Nesse trabalho utilizou um valor igual a 12 para liberações saturadas e com baixo grau de subresfriamento.

Para o processo de atomização *flash*, uma velocidade de aceleração é primeiro definida como a diferença entre a velocidade expandida e a velocidade de vazamento:

$$u_{acc} = u_f - u_e \quad (4.25)$$

Em seguida, uma velocidade relativa é introduzida como a soma vetorial da velocidade de aceleração e uma velocidade de crescimento da bolha (u_{bub}) (Equação 4.26).

$$u_{rel} = \sqrt{u_{acc}^2 + u_{bub}^2} \quad (4.26)$$

A velocidade de crescimento da bolha é derivada de uma versão simplificada da teoria da quebra por *flashing* devido ao rápido crescimento de bolhas no líquido superaquecido (FORESTER e ZUBER, 1954; LIENHARD e DAY, 1970). A expressão para essa velocidade é mostrada na Equação 4.27.

$$u_{bub} = \varphi^2 C_{bub}^2 n_d^{1/3} \quad (4.27)$$

onde n_d é a densidade do local de nucleação do líquido e φ é um fator de correção ajustável. Estes dois parâmetros são, portanto, constantes de ajuste para o modelo. Os valores recomendados são $n_d = 10^{10} \frac{locals}{m^3}$ e $\varphi = 1$. A taxa de crescimento da bolha (C_{bub}) é expressa como uma função do Número de Jacob e da difusividade térmica do líquido, conforme mostra a Equação 4.28:

$$C_{bub} = \phi_{v,f} \frac{\rho_{l,f}}{\rho_{v,f}} \sqrt{\pi \frac{k_{l,f}}{\rho_{l,f} C_{p,l,f}}} \quad (4.28)$$

onde k_l é a condutividade térmica da fase líquida.

Finalmente, calcula-se o diâmetro representativo para gotículas formadas pelo processo de atomização *flash* (dp_2).

$$d_{p,2} = \frac{We_c \sigma_{l,f}}{\rho_{v,f} u_{rel}^2} \quad (4.29)$$

O diâmetro representativo do spray é calculado utilizando a Equação 4.30 e o diâmetro médio é obtido a partir da Equação 4.31 abaixo, com o valor recomendado de 1,8 para σ_G .

$$d_{p,n} = \min(d_{p,1}, d_{p,2}) \quad (4.30)$$

$$SMD = d_{p,n} \cdot e^{2.5 \ln(\sigma_G)^2} \quad (4.31)$$

4.2.1.2 Modelo Recomendado pelo Yellow Book

O Yellow Book (BOSCH *et al.*, 2005) recomenda um modelo baseado no trabalho de Appleton (1984) no qual os dois modelos de quebra do líquido são considerados (quebra mecânica e devido ao *flash*). O diâmetro é calculado para uma única gota e a correlação utilizada irá depender da temperatura de liberação e dos números adimensionais de Reynolds e de Weber. Dessa forma, se $We_f < Re_f^{-0.45} \times 10^6$ e $T_e < 1.11T_b$, a correlação aplicada será a Equação 4.32, caso contrário deve-se aplicar a Equação 4.33, a qual é derivada da equação do número de Weber.

$$SMD = 3,78. R_f \sqrt{\left(1 + 3 \frac{We_f^{1/2}}{Re_f}\right)} \quad (4.32)$$

$$SMD = We_c \frac{\sigma_{l,f}}{u_f^2 \rho_a} \quad (4.33)$$

O número crítico de Weber (We_c) é definido como um valor recomendado de 15, R_f é o raio do jato após a expansão e os números de Reynolds e Weber são baseados nas propriedades pós-expansão, conforme mostram as Equações 4.34 e 4.35.

$$Re_f = \frac{2R_f u_f}{\mu_{l,f}} \quad (4.34)$$

$$We_f = \frac{2R_f u_f^2 \rho_{l,f}}{\sigma_{l,f}} \quad (4.35)$$

onde $\mu_{l,f}$ e $\rho_{l,f}$ são viscosidade dinâmica e densidade da fase líquida, respectivamente.

4.2.1.3 Modelo Phast-JIP III.

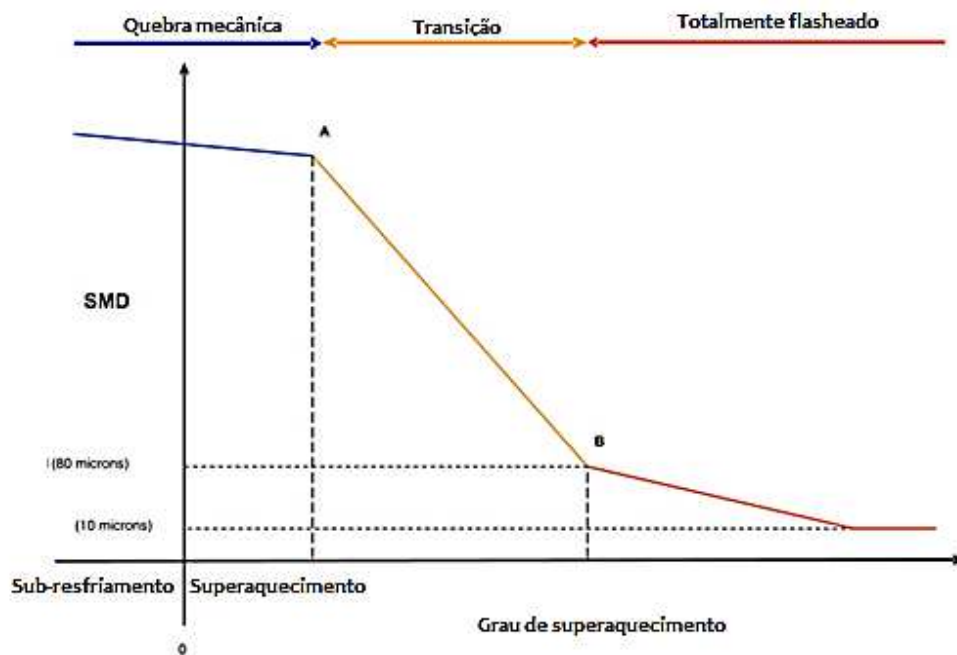
A correlação JIP da Fase III relatada em Witlox *et al.* (2010), foi derivada pela Cardiff University como parte do estágio “A” da Fase III do JIP a partir de uma nova série de experimentos em escala de água e ciclohexano (veja o trabalho de Kay *et al.* (2010) para mais detalhes). Witlox *et al.* (2010) propuseram que a variação do diâmetro médio das gotas com o grau de superaquecimento poderia ser dividida em três regimes distintos, conforme mostra a Figura 4.2, que são modelados separadamente: quebra mecânica (antes do ponto A), transição para *flashing* (entre os pontos A e B) e *fully flashing* (após o ponto B). No primeiro regime, o superaquecimento é baixo e os valores SMD são bastante elevados. Neste regime, o diâmetro

médio é expresso como uma função da razão L/d_e , o número de Reynolds líquido ($Re_{l,e}$) e o número de Weber líquido ($We_{l,e}$):

$$\frac{d_d^A}{d_e} = 74We_{l,e}^{-0.854}Re_{l,e}^{0.441}\left(\frac{L}{d_e}\right)^{0.114}\left(\frac{\mu_{l,e}}{\mu_{water,stp}}\right)^{0.971} \dots \left(\frac{\sigma_{l,e}}{\sigma_{water,stp}}\right)^{-0.368}\left(\frac{\rho_{l,e}}{\rho_{water,stp}}\right)^{-0.107} \quad (4.36)$$

L é o comprimento do tubo ou espessura do vaso, os subscritos (l,e) referem-se às propriedades do líquido obtidas nas condições de saída e os subscritos (water, stp) indicam propriedades da água tomadas à temperatura e pressão padrão (1 atm e 273 K). Para $L/d_e < 1$ e $L/d_e > 50$ os valores de corte $L/d_e = 1$ e $L/d_e = 50$ são aplicados.

Figura 4.2 - Curva tri-linear para o diâmetro médio da gota em função do superaquecimento.



Fonte: Witlox *et al.* (2010).

O critério de transição para o segundo regime foi derivado de dados experimentais para jatos *flashing*. Conforme ilustrado na Figura 4.2, o SMD (diâmetro médio) é aqui expresso como uma curva tri-linear em função do superaquecimento ΔT_{sh} que, por sua vez, é calculado pela Equação 4.37.

$$\Delta T_{sh} = T_e - T_{sat}(P_a) \quad (4.37)$$

onde T_e é a temperatura do orifício de vazamento e $T_{sat}(P_a)$ é a temperatura de saturação à pressão ambiente. Para componentes puros, a temperatura de saturação será igual a temperatura de bolha do componente.

O segundo regime, ou seja, a transição para totalmente *flashing* ou *fully flashing*, começa quando o superaquecimento atinge o valor definido por ΔT_{sh}^A , e termina quando o superaquecimento atinge o valor definido por ΔT_{sh}^B , obtidos pelas Equações 4.38 e 4.39, respectivamente.

$$\Delta T_{sh}^A = \frac{L_{v,e} \rho_{v,e}}{Cp_{l,e} \rho_{l,e}} 48 \frac{We_{v,e}^{-1/7}}{\phi} \quad (4.38)$$

$$\Delta T_{sh}^B = \frac{L_{v,e} \rho_{v,e}}{Cp_{l,e} \rho_{l,e}} 108 \frac{We_{v,e}^{-1/7}}{\phi} \quad (4.39)$$

onde $We_{v,e} = \rho_{v,e} u_e^2 d_e / \sigma_{l,e}$ e $\phi = 1 - e^{-2300 \rho_{v,e} / \rho_{l,e}}$.

O terceiro regime, o regime *fully flashing*, começa no ponto B e o diâmetro médio (d_d^B) é considerado como sendo 80 μm . Além deste ponto, o diâmetro diminui a uma taxa constante de 0,1 $\mu\text{m}/\text{K}$ até que um valor de corte de 10 μm ($d_{d,min}$) seja alcançado.

Finalmente, o diâmetro médio das gotículas calculado pelo Modelo Phast-JIP III segue os seguintes critérios:

$$SMD = d_d^A, \quad se \Delta T_{sh} \leq \Delta T_{sh}^A \quad (4.40)$$

$$SMD = d_d^A - \frac{\Delta T_{sh} - \Delta T_{sh}^A}{\Delta T_{sh}^B - \Delta T_{sh}^A} (d_d^A - d_d^B), \quad se \Delta T_{sh}^A < \Delta T_{sh} \leq \Delta T_{sh}^B \quad (4.41)$$

$$SMD = \max\{d_{d,min}, [\min(d_d^A, d_d^B) - 10^{-7}(\Delta T_{sh} - \Delta T_{sh}^B)]\}, \quad (4.42)$$

$$se \Delta T_{sh} > \Delta T_{sh}^B$$

De acordo com Witlox *et al.* (2010), o modelo é aplicável a liberações como líquido metaestável para toda a faixa de superaquecimento.

4.2.1.4 Modelo de Tilton e Farley (1990).

Dentre os modelos apresentados acima, o de Tilton e Farley (1990) é o mais simples. O modelo é aplicado ao regime aerodinâmico e depende somente da velocidade de expansão e das propriedades do fluido, como é mostrado na Equação (4.43).

$$SMD = 0.585 \frac{1}{u_f} \sqrt{\frac{\sigma_{l,f}}{\rho_{l,f}}} \quad (4.43)$$

4.3 Modelagem para a Dispersão de Gotículas

O processo de vaporização bem como o estudo do movimento de gotículas, são de grande importância em muitos sistemas de energia que envolvem combustão por spray, como motores a diesel, turbinas a gás, motores de foguetes líquidos, fornos industriais, etc. O fenômeno de dispersão de partículas ocorre em muitas outras áreas de aplicação de engenharia. Isso inclui revestimento por spray, pintura, pesticidas, aerossóis e transporte no ambiente natural.

Em particular, como mencionado anteriormente, o processo *flashing* faz com que o líquido se quebre em gotículas finas. Em graus de superaquecimento mais baixos, as gotículas são formadas principalmente devido à atomização aerodinâmica. As gotículas maiores caem no chão, enquanto as restantes evaporam à medida que são transportadas na direção do vento. Dessa forma, é importante determinar a trajetória das gotículas, para assim determinar o ponto onde elas caem e, conseqüentemente, onde a poça é formada. É importante, ainda, prever a fração mássica de líquido que evapora ou permanece suspensa como gotículas de aerossol, uma vez que o vapor formado irá aumentar a concentração do componente no ambiente.

A modelagem utilizada compreende o modelo de condutividade infinita do líquido no qual a temperatura na superfície da gota é uniforme, variável no tempo e igual à temperatura no interior da gota. O gás é considerado quase estacionário, portanto, as transferências térmicas e de massa na fase gasosa dependem apenas da distância da superfície da gota. Outras considerações são:

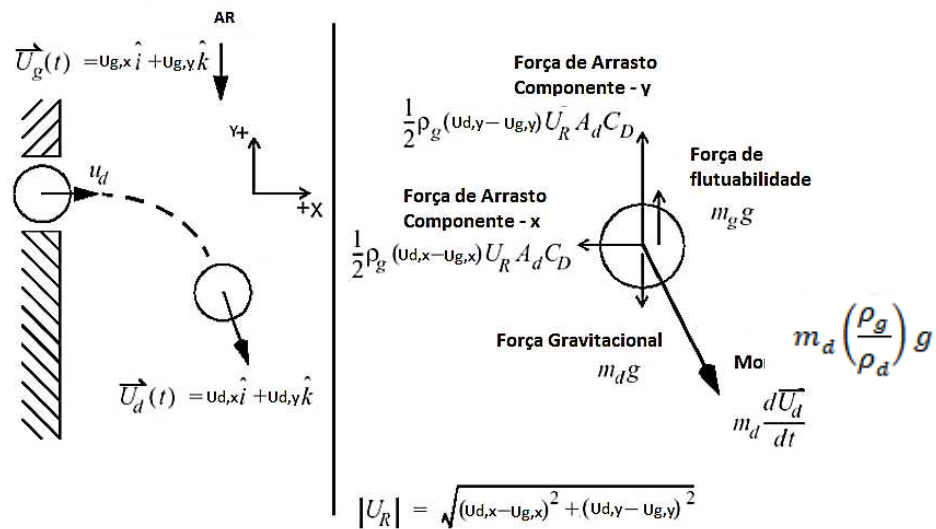
- Gotas monodispersas;
- Formato esférico;
- Uniformes;
- Solubilidade do ar no líquido insignificante;
- Não ocorrem reações químicas;

- Nenhuma transferência de calor devido à radiação;
- Não ocorrem interações;
- Não há difusão de espécies da fase líquida (dentro da gota).

4.3.2 Dinâmica das Gotículas

Vários efeitos influenciam a dinâmica das gotículas tais como efeitos devidos à aceleração, rotação, rarefação, circulação interna nas gotículas, condensação, deformação, surfactantes, contaminação da superfície e efeitos históricos. Esses efeitos foram discutidos até certo ponto na literatura (por exemplo, TEMKIN e KIM, 1980; TEMKIN e MEHTA, 1982; OGUZ e SADHAL, 1988) mas não são considerados neste trabalho. A Figura 4.3 mostra algumas forças atuantes na partícula.

Figura 4.3 - Forças atuando na gota.



Fonte: NASA/CR, 2000-210467

A equação do movimento para uma gota de massa m_d (Equação 4.44), pode ser representada em sua forma geral pela Equação 4.45 (Frohn e Roth, 2000).

$$m_d = \rho_d \frac{\pi}{6} d_d^3 \quad (4.44)$$

$$m_d \frac{du_d}{dt} = F_r \quad (4.45)$$

onde F_r representa o somatório das possíveis forças atuantes sobre a partícula e ρ_d , d_d e u_d são a densidade, diâmetro médio e velocidade das gotículas.

A variação do momento da gota na direção vertical em relação ao tempo é igual ao momento perdido devido à perda de massa (evaporação) e ao momento perdido (ou ganho) devido às forças que atuam na gota (flutuabilidade- B , peso - W e arrasto- $F_{A,y}$). Dessa forma, o balanço de momento vertical pode ser representado pela Equação 4.46 (PAPADOURAKIS, 1991).

$$\frac{d(m_d u_{d,y})}{dt} = u_{d,y} \frac{d(m_d)}{dt} + B - W - F_{A,y} \quad (4.46)$$

onde $B = m_d \left(\frac{\rho_g}{\rho_d}\right) g$, $W = m_d g$, ρ_g é a densidade do gás em torno da gota (veja a Equação 4.99 do Quadro 4.3), ρ_d é a densidade da fase líquida calculada na temperatura da gota e g é a aceleração da gravidade.

A velocidade na direção y é considerada positiva se a gota estiver se movendo para cima e negativa se a gota estiver caindo. Após modificações algébricas, o balanço de momento na direção y se torna:

$$\frac{du_{d,y}}{dt} = g \left(\frac{\rho_g}{\rho_d} - 1\right) - \frac{C_{D,ev} \left(\frac{\pi d_d^2}{4}\right) \frac{1}{2} \rho_g (u_{d,y} - u_{g,y}) |\vec{U}_R|}{m_d} \quad (4.47)$$

onde \vec{U}_R é a velocidade resultante da gota (veja a Figura 4.3) e $u_{g,y}$ é a componente vertical da velocidade do gás no jato (veja a Equação 4.105). O modelo para essa fase gás é apresentado mais adiante (veja o tópico 4.4). C_D é o coeficiente de arraste e depende do número de Reynolds da gota (Re_d), sendo dado por:

$$C_D = \frac{24}{Re_d}, \quad Re_d < 0.1 \quad (4.48)$$

$$C_D = \left(\frac{24}{Re_d}\right) \left(1 + \frac{3Re_d}{16} + 9Re_d^2 \frac{\ln(2Re_d)}{160}\right), \quad 0.1 < Re_d < 2 \quad (4.49)$$

$$C_D = \left(\frac{24}{Re_d}\right) (1 + 0.15Re_d^{0.687}), \quad 2 < Re_d < 500 \quad (4.50)$$

$$C_D = 0,44, \quad 500 < Re_d < 200000 \quad (4.51)$$

Onde o Reynolds da gota é definido como:

$$Re_d = \frac{\rho_g |\vec{U}_R| d_d}{\mu_g} \quad (4.52)$$

Uma vez que o fluxo de Stefan reduz o coeficiente de arrasto (ABRAMZON; SIRIGNANO, 1989), Sazhin *et al.* (2005) sugeriram uma modificação do C_D para a evaporação da gota, para o qual a simbologia utilizada neste trabalho é $C_{D,ev}$. O valor do novo coeficiente de arraste é obtido pela Equação 4.53.

$$C_{D,ev} = \frac{C_D}{(1 + B_M)^{\alpha_M}} \quad (4.53)$$

B_M é o número de transferência de massa de Spalding e é definido no próximo tópico e α_M é um parâmetro que assume um valor igual a 1 para $B_M < 0.78$ e é igual a 0.75 para $B_M \geq 0.78$.

A partir da dinâmica da gota é possível determinar sua trajetória. As Equações 4.54 e 4.55 descrevem a trajetória de gotículas nas direções horizontal (x) e vertical (y), respectivamente. A componente horizontal da velocidade da gota é considerada igual a componente horizontal da velocidade do jato bifásico e inclui a velocidade do vento (u_w) (caso haja).

$$\frac{dX_d}{dt} = u_{d,x} + u_w \quad (4.54)$$

$$\frac{dY_d}{dt} = u_{d,y} \quad (4.55)$$

4.3.2 Modelagem da Vaporização de Gotículas

O modelo utilizado para avaliar a vaporização das gotículas foi o formulado por Abramzon e Sirignano (1989) o qual considera a existência de um filme de vapor ao redor da gota bem como os efeitos do fluxo de Stefan nas transferências de calor e massa. Dessa forma, eles introduziram dois fatores de correção, F_M e F_T , que representam a mudança relativa das espessuras térmica e difusional do filme devido ao fluxo de Stefan, a fim de levar em consideração o fato de que um sopro na superfície resulta no espessamento das camadas limites térmica e mássica. Essa consideração leva às expressões modificadas para os números de Sherwood e Nusselt, conforme as Equações 4.57 e 4.58, que aparecem nas equações dos fluxos de massa e calor, respectivamente. Nesse caso, a taxa mássica de evaporação da gota é calculada usando a Equação 4.56.

$$\frac{dm_d}{dt} = -\pi d_d \rho_{g, film} D_{AB, film} Sh^* \ln(1 + B_M) \quad (4.56)$$

$$Sh^* = 2 + \frac{(Sh_0 - 2)}{F_M} \quad (4.57)$$

$$Nu^* = 2 + \frac{(Nu_0 - 2)}{F_T} \quad (4.58)$$

onde o subíndice “*film*” indica que a propriedade é avaliada no filme em torno da gota (veja o tópico 4.3.2.1). Assim, $\rho_{g,film}$ e $D_{AB,film}$ são a densidade e o coeficiente de difusão do gás no filme.

Ainda de acordo com Abramzon e Sirignano (1989), as correlações de Frossling podem ser usadas para Sh_0 e Nu_0 , porém elas superestimam a taxa de transferência em números baixos de Reynolds ($Re < 10$) além de preverem a supersensibilidade fisicamente incorreta da taxa de transferência para as pequenas flutuações de velocidade próximas à $Re = 0$. Dessa forma, uma alternativa é utilizar as correlações de Clift *et al.* (1978) (Equações 4.59 e 4.60).

$$Sh_0 = 1 + (1 + Re_d \cdot Sc_{film})^{1/3} \cdot f(Re_d) \quad (4.59)$$

$$Nu_0 = 1 + (1 + Re_d \cdot Pr_{film})^{1/3} \cdot f(Re_d) \quad (4.60)$$

onde $f(Re_d) = 1$ se $Re_d = 1$ e $f(Re_d) = Re_d^{0,077}$ em $Re_d \leq 400$. Sc_{film} e Pr_{film} são os números adimensionais de Schmidt e Prandt, respectivamente, calculados no filme conforme mostra as Equações 4.61 e 4.62.

$$Sc_{film} = \frac{\mu_{g,film}}{\rho_{g,film} D_{g,film}} \quad (4.61)$$

$$Pr_{film} = \frac{Cp_{g,film} \mu_{g,film}}{k_{g,film}} \quad (4.62)$$

onde $\mu_{g,film}$, $Cp_{g,film}$ e $k_{g,film}$ são, respectivamente, viscosidade dinâmica, capacidade calorífica e condutividade térmica da mistura de gás no filme. As propriedades de mistura são calculadas conforme o que é descrito no tópico 4.3.2.2.

F_M e F_T nas Equações 4.57 e 4.58, são fatores de correção que levam em consideração a variação relativa e de temperatura, respectivamente, na espessura do filme devido ao processo de evaporação de gotículas e são obtidos por meio das Equações 4.63 e 4.64.

$$F_M = (1 + B_M)^{0,7} \frac{\ln(1 + B_M)}{B_M} \quad (4.63)$$

$$F_T = (1 + B_T)^{0.7} \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \quad (4.64)$$

B_M representa o número de transferência de massa de Spalding definido por:

$$B_M = \frac{(y_{vs} - y_g)}{1 - y_{vs}} \quad (4.65)$$

Em que y_{vs} é a fração mássica do vapor na superfície da gota e y_g é a fração mássica do vapor distante da gotícula (veja a Equação 4.100 do Quadro 4.3). A concentração na superfície da gota é obtida a partir das Equações 4.66 e 4.67, considerando o equilíbrio entre fases e aplicando-se a equação de Clausius-Clapeyron.

$$x_{vs} = \frac{P_{v,s}}{P_a} e^{\left[\frac{L_{v,s} MW_{fuel}}{R} \left(\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_d} \right) \right]} \quad (4.66)$$

$$y_{vs} = \frac{x_{vs} MW_{fuel}}{x_{vs} MW_{fuel} + (1 - x_{vs}) MW_{g, film}} \quad (4.67)$$

MW_{fuel} é a massa molar da substância pura e $MW_{g, film} = x_{ref} MW_{fuel} + (1 - x_{ref}) MW_a$, onde x_{ref} é a composição molar de referência (veja o tópico 4.3.2.1) e MW_a é a massa molar do ar.

B_T é o número de transferência de calor de Spalding que está relacionado ao número de transferência de massa B_M por:

$$B_T = (1 + B_M)^\delta - 1 \quad (4.68)$$

$$\text{onde } \delta = \frac{c_{p,v, film} Sh^*}{c_{p,g, film} Nu^*} \frac{1}{Le} \text{ e } Le = \frac{k_{g, film}}{\rho_{g, film} D_{g, film} c_{p,g, film}}$$

Para obter B_T é necessário realizar um processo iterativo. O algoritmo sugerido é apresentado no Quadro 4.2.

4.3.2.1 Avaliação das Propriedades no Filme em Torno da Gota

As propriedades das espécies de vapor do componente e ar no filme foram determinadas usando a conhecida “regra 1/3”, como proposto por Yuen e Chen (1976). Este método consiste em calcular um estado de “referência” no qual todas as propriedades são determinadas. A temperatura de referência ($T_{ref, film}$) e a fração mássica do vapor de combustível ($Y_{ref, film}$) são dadas pelas Equações 4.69 e 4.70.

$$T_{ref, film} = T_d + \frac{1}{3}(T_g - T_d) \quad (4.69)$$

$$Y_{ref, film} = y_{vs} + \frac{1}{3}(y_g - y_{vs}) \quad (4.70)$$

T_g é a temperatura do gás distante da gota (veja a Equação 4.91) e T_d a temperatura da gota.

Quadro 4.2 - Algoritmo para obtenção de B_T .

Algoritmo para obter B_T
1. Calcule o número de transferência de massa B_M , o fator de correção F_M , o número de Sherwood modificado S_h^* e a taxa de vaporização (Equações 4.65, 4.63, 4.57 e 4.56, respectivamente).
2. Calcule a estimativa inicial fazendo $B_T = B_M$.
3. Admita a precisão desejada no cálculo de B_T , ϵ_B .
4. Admita um erro inicial no valor de B_T , $ B_T - B_T^0 = 1$.
5. Calcule o fator de correção F_T (Equação 4.64).
6. Calcule o fator δ .
7. Calcule o valor corrigido do número de transferência de calor B_T (Equação 4.68)
8. Retorne ao passo 5 se $ B_T - B_T^0 > \epsilon_B$.

4.3.2.2 Cálculo das Propriedades de Mistura no Filme

As regras aditivas padrão para um gás ideal são usadas para o cálculo da densidade da mistura ar-vapor ($\rho_{g, film}$) e capacidade calorífica à pressão constante ($Cp_{g, film}$). Assim, utilize-se as Equações 4.71 e 4.72.

$$\rho_{g, film} = \frac{1}{\frac{(1 - Y_{ref, film})}{(\rho_{a, film})} + \frac{Y_{ref, film}}{\rho_{v, film}}} \quad (4.71)$$

$$Cp_{g, film} = Y_{ref, film} Cp_{v, film} + (1 - Y_{ref, film}) Cp_{a, film} \quad (4.72)$$

Para a viscosidade dinâmica ($\mu_{g,filme}$) e a condutividade térmica ($k_{g,filme}$), está sendo usada a regra de Wilke (EDWARDS *et al.*, 1979 apresentado em KOLAITIS e FOUNTI, 2002) representada pela Equação 4.73.

$$\psi_{g,film} = \frac{x_{ref,filme}\psi_{v,film}}{x_{ref,filme} + (1 - x_{ref,filme})\Omega_{v,a}} + \frac{(1 - x_{ref,filme})\psi_{a,film}}{x_{ref,filme}\Omega_{a,v} + (1 - x_{ref,filme})} \quad (4.73)$$

onde $x_{ref,filme}$ é a fração molar de referência no filme e calculada a partir da Equação 4.74 e $\Omega_{v,a}$ é obtido pela Equação 4.75.

$$x_{ref,filme} = \frac{Y_{ref,filme} \left(\frac{1}{MW_{fuel}} \right)}{\left[Y_{ref,filme} \left(\frac{1}{MW_{fuel}} \right) + (1 - Y_{ref,filme}) \left(\frac{1}{MW_a} \right) \right]} \quad (4.74)$$

$$\Omega_{i,j} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{MW_i}{MW_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\psi_{i,filme}}{\psi_{j,filme}} \right)^{1/2} \left(1 + \frac{MW_j}{MW_i} \right)^{1/4} \right]^2 \quad (4.75)$$

onde ψ denota μ ou k e os subíndices “i” e “j” serão “a” (ar) ou “v” (vapor do componente).

4.3.3 Temperatura da Gota

A evaporação é acoplada à energia/aquecimento da gota na avaliação da evolução do seu tamanho, onde a variação de temperatura da gota é descrita pela Equação 4.76.

$$\frac{dT_d}{dt} = - \frac{6\dot{Q}_l}{m_d C p_d} \quad (4.76)$$

\dot{Q}_l é a taxa de fluxo de calor que penetra na gota e é calculada de maneira semelhante à taxa de evaporação e relacionada a ela por:

$$\dot{Q}_l = \frac{dm_d}{dt} \left(\frac{C p_{v,f}(T_g - T_d)}{B_T} - L_v(T_d) \right) \quad (4.77)$$

onde L_v é o calor latente de vaporização do componente, calculado na temperatura da gota. Para aplicação no balanço de energia, a taxa de vaporização utilizada é a correlação da Equação 4.78 que, segundo Abramzon e Sirignano (1989), gera o mesmo resultado da Equação 4.56.

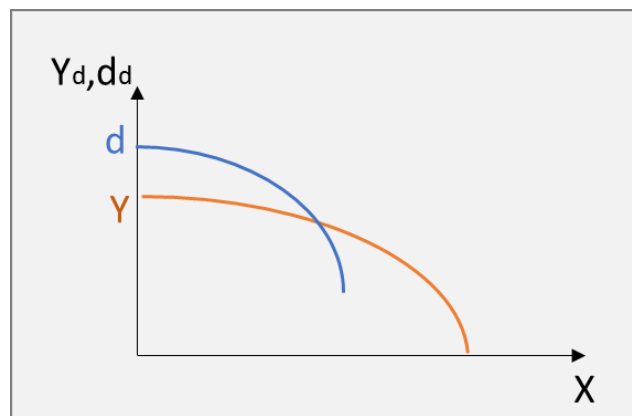
$$\frac{dm_d}{dt} = -\pi \frac{k_{g, film}}{Cp_{v,f}} d_d \cdot Nu^* \ln(1 + B_T) \quad (4.78)$$

Por fim, o diâmetro da gota é calculado com base na Equação 4.44.

4.3.4 Estimativa de Rainout

A chuva (*rainout*) irá ocorrer se o gráfico para a trajetória e tamanho de gota apresentar comportamento semelhante ao apresentado na Figura 4.4. Como pode ser observado, antes de evaporar completamente ($d_d \neq 0$) a gota atinge o chão ($Y_d = 0$) configurando na formação da poça.

Figura 4.4 - Gráfico utilizado como base para avaliação da formação de chuva.



Fonte: Elaborado pelo autor.

4.4 Modelagem Matemática do Jato

Como mencionado anteriormente, após expandir, o jato bifásico, que possui um determinado momento, começa a arrastar o ar do ambiente provocando trocas de massa e energia com as gotículas. Assim, definir a modelagem dos processos envolvidos nessa região é de suma importância para prever o comportamento do jato.

As Equações 4.79, 4.80, 4.81, 4.82 e 4.83 são as correlações gerais de balanço usadas para o jato bifásico na região de *entrainment* (BRICARD e FRIEDEL, 1998; MURALIDHAR *et al.*, 1995; MELHEM e SAINI, 1992).

Conservação por espécie:

$$\frac{dq_c}{ds} = 0 \quad (4.79)$$

Conservação de massa total:

$$\frac{dq_{jet}}{ds} = \frac{dq_a}{ds} \quad (4.80)$$

Conservação de energia:

$$\frac{d(q_{jet}H_{jet})}{ds} = \frac{dq_a}{ds} h_{a,\infty} \quad (4.81)$$

Conservação de momento horizontal:

$$\frac{dP_x}{ds} = u_w \frac{dq_a}{ds} + C_d \pi R_{jet} \rho_{a,\infty} (u_w^2) |\sin^3 \theta| \quad (4.82)$$

Conservação de momento vertical:

$$\frac{dP_y}{ds} = A_{jet} g (\rho_{a,\infty} - \rho_{jet}) \pm C_d \pi R_{jet} \rho_{a,\infty} (u_w^2) \cos \theta \sin \theta |\sin \theta| \quad (4.83)$$

onde $C_d = 0.3$ e $\rho_{a,\infty}$ é a densidade do ar nas condições ambiente. O sinal “+” é utilizado se $-\pi/2 \leq \theta < 0$ e o sinal “-” é utilizado quando $0 \leq \theta < \pi/2$.

Observe que as equações acima são expressas com base em uma trajetória curvilínea “s”. De uma forma geral, adotou-se essa base. Dessa forma, as correlações que descrevem a gota são convertidas com base na relação apresentada na Equação 4.84.

$$\frac{d(\)}{ds} = \frac{d(\)}{dt} \frac{1}{u} \quad (4.84)$$

Na Equação 4.79, q_c é a vazão total do componente liberado (vazão da fase vapor (q_{vc}) + vazão da fase líquida (q_{lc})) e a variação igual a zero implica dizer que a quantidade total do componente no jato bifásico não varia, obedecendo ao princípio de conservação de massa.

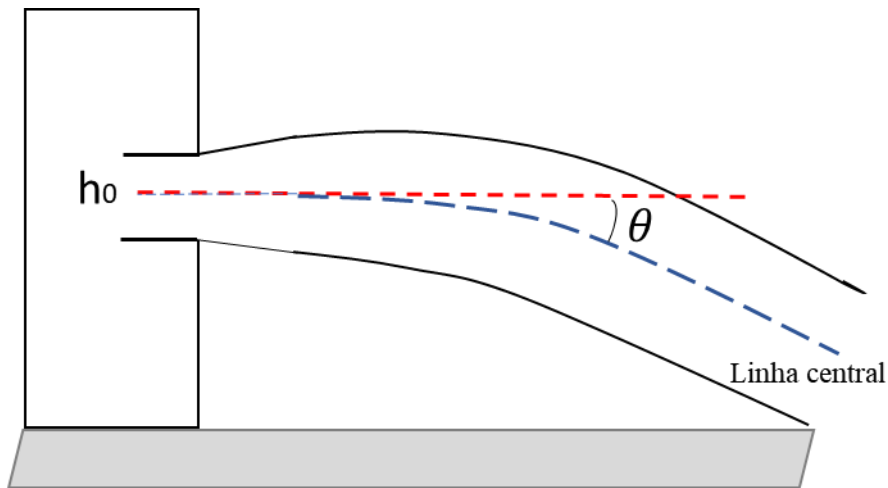
Na Equação 4.80, q_{jet} é a vazão total do jato bifásico considerando as fases líquida e vapor do componente e o ar arrastado. O termo $\frac{dq_a}{ds}$ representa a quantidade de ar arrastado para dentro do jato e é calculada utilizando a Equação 4.85. Essa equação é obtida com base no modelo de Ricou e Spalding (1961).

$$\frac{dq_a}{ds} = 2\pi R_{jet} \rho_{a,\infty} \left(\alpha_1 \sqrt{\frac{\rho_{jet}}{\rho_{a,\infty}}} |u_{jet} - u_w \cos \theta| + \alpha_2 u_w \cos \theta |\sin \theta| + \alpha_3 u' \right) \quad (4.85)$$

onde α_1 , α_2 e α_3 são os coeficientes de arraste para um jato livre, para uma linha térmica e causado pela turbulência atmosférica, respectivamente. Neste trabalho assumiu-se os valores de 0.0806 (RICOU e SPALDING, 1961), 0.5 e 1.0 (OOMS, 1972 apresentado em MURALIDHAR *et al.* 1995). R_{jet} , ρ_{jet} e u_{jet} são, respectivamente, o raio da seção transversal, densidade e velocidade do jato bifásico. $\rho_{a,\infty}$ é a densidade do ar calculada nas condições ambiente e θ é o ângulo de inclinação do jato, conforme mostra a Figura 4.5, obtido a partir da Equação 4.86 e é expresso em radianos.

$$P_y = A_{jet} \rho_{jet} u_{jet}^2 \text{sen } \theta \quad (4.86)$$

Figura 4.5 - Ilustração do ângulo de inclinação do jato bifásico.



Fonte: Elaborado pelo autor.

A trajetória da linha central do jato é definida pelas Equações 4.87 e 4.88.

$$\frac{dX_{jet}}{ds} = \cos \theta \quad (4.87)$$

$$\frac{dY_{jet}}{ds} = \text{sen } \theta \quad (4.88)$$

A última contribuição da Equação 4.85 vem da turbulência atmosférica e u' é a velocidade média quadrada de flutuação para o fluxo turbulento e pode ser aproximada pela relação da Equação 4.89 (MURALIDHAR *et al.*, 1995; MELHEM e SAINI, 1992).

$$u' = (\varepsilon R_{jet})^{1/3} \quad (4.89)$$

onde ε é a dissipação de energia turbulenta por unidade de massa que, para atmosfera neutra, é obtida pela Equação 4.90.

$$\varepsilon = 0.0677 \frac{w}{y} \quad (4.90)$$

De acordo com Muralidhar *et al.* (1995), Kaimal *et al.* (1976) atribui valores para ε de 0.004 e 0.0 para atmosferas instáveis e estáveis, respectivamente. Neste trabalho, considerou-se um ambiente de atmosfera estável.

No balanço de energia (Equação 4.81), H_{jet} é a entalpia total do jato bifásico e $h_{a,\infty}$ é a entalpia específica do ar na temperatura ambiente. A partir desse balanço é possível obter a Temperatura da fase gás (T_g). Nikmo *et al.* (1994) apresentaram um modelo que considera a influência da evaporação das gotas e do ar arrastado no balanço de energia, no entanto, não contabiliza o efeito da fase vapor do componente. Em outras palavras, Nikmo *et al.* (1994) considera uma gota dispersando apenas em ar.

Como mencionado anteriormente, nesse trabalho considera-se que a fase gás é composta pelo vapor do componente e ar ambiente, sendo assim, diferente de Nikmo *et al.* (1994), os efeitos do vapor são contabilizados. Assim, o modelo aqui utilizado é mais completo e a temperatura do gás é obtida a partir da Equação 4.91.

$$\frac{dT_g}{ds} = \frac{\frac{dq_a}{ds} h_{a,\infty} - \left(\frac{dq_a}{ds} h_{a,jet} + \frac{dq_{v,c}}{ds} h_{vc,jet} + \frac{dq_{l,c}}{ds} h_{lc,jet} - C_{pl,d} \frac{dT_d}{ds} q_{l,c} \right)}{C_{p_{v,a}} q_a + C_{p_{v,c}} q_{v,c}} \quad (4.91)$$

onde $h_{a,jet}$, $h_{vc,jet}$ e $h_{lc,jet}$ são as entalpias específica do ar, vapor e da fase líquida (gota) do componente, calculadas pelas Equações 4.92, 4.93 e 4.94, respectivamente. $C_{p_{l,d}}$, $C_{p_{v,a}}$ e $C_{p_{v,c}}$ são as capacidades caloríficas da fase líquida, do ar e do vapor do componente, nessa ordem.

$$h_{a,jet} = \int_{T_{ref}}^{T_g} C_{p_{v,a}} dT \quad (4.92)$$

$$h_{vc,jet} = \int_{T_{ref}}^{T_g} C_{p_{v,c}} dT \quad (4.93)$$

$$h_{lc,jet} = \int_{T_{ref}}^{T_d} C_{p_{v,c}} dT - L_{v,d}(T_d) \quad (4.94)$$

A entalpia específica do ar na temperatura ambiente é calculada conforme a Equação 4.92 substituindo T_g por T_a . A vazão mássica de líquido ($q_{l,c}$) é o produto entre a quantidade de gotas por segundo (N_d) e a massa da gota. O número de gotas é obtido considerando a massa e vazão de líquido no ponto “f”. Uma vez que nenhuma distribuição de tamanho é considerada,

N_d é constante durante a dispersão. A vazão mássica de vapor ($q_{v,c}$) é obtida considerando a conservação de massa da espécie componente. A temperatura de referência considerada é igual a temperatura ambiente. As demais variáveis necessárias ao modelo são obtidas conforme as Equações do Quadro 4.3.

Quadro 4.3 - Correlações para algumas variáveis do jato.

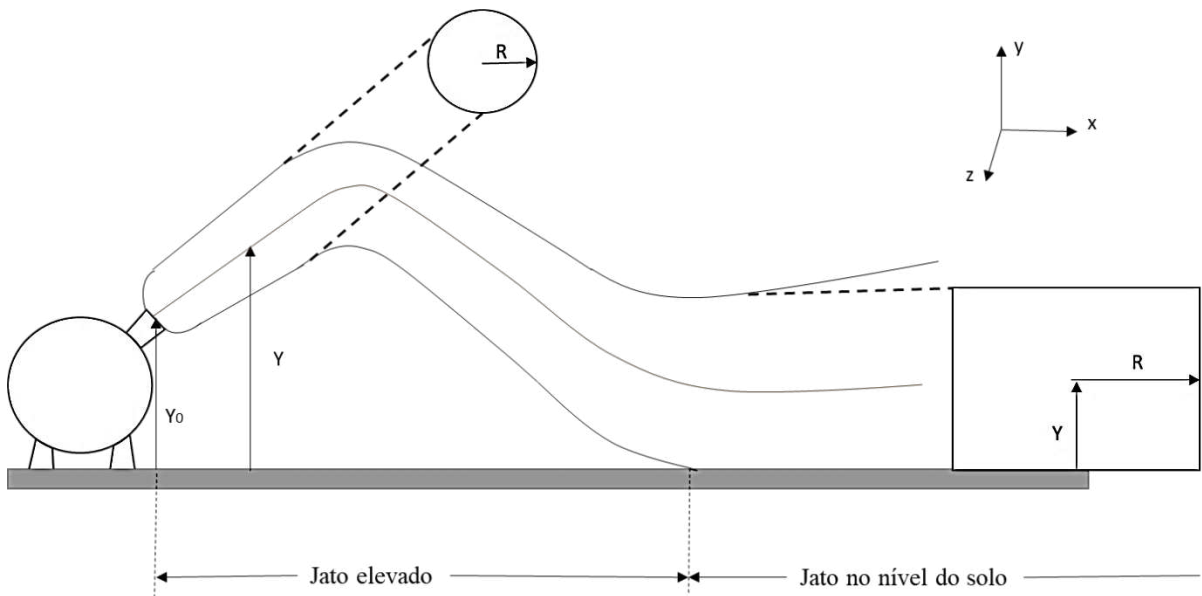
Variável	Definição	Correlação	Unidade
q_M	Momento resultante	$q_M = \sqrt{P_x^2 + P_y^2}$ (4.95)	$kg.m/s^2$
u_{jet}	Velocidade do jato	$u_{jet} = \frac{q_M}{q_{jet}}$ (4.96)	m/s
ρ_{jet}	Densidade do jato	$\rho_{jet} = \frac{1}{\frac{(1 - \phi_g)}{\rho_{l,jet}} + \frac{\phi_g}{\rho_g}}$ (4.97)	kg/m^3
ϕ_g	Fração mássica de gás	$\phi_g = \frac{q_a + q_{vc}}{q_{jet}}$ (4.98)	kg/kg
ρ_g	Densidade do gás	$\rho_g = \frac{1}{\frac{(1 - y_g)}{(\rho_{a,jet})} + \frac{y_g}{\rho_{v,jet}}}$ (4.99)	kg/m^3
y_g	Fração mássica de vapor no gás	$y_g = \frac{q_{v,c}}{q_a + q_{v,c}}$ (4.100)	kg/kg
A_{jet}	Área da seção transversal do jato	$A_{jet} = \frac{q_M}{u_{jet}^2 \rho_{jet}}$ (4.101)	m^2
u_g	Velocidade do gás (vapor + ar)	$u_g = \frac{q_a + q_{v,c}}{\rho_g z_g A_{jet}}$ $z_g = \frac{V_g}{V_g + V_d}$ (4.102)	m/s
V_g	Volume ocupado pelo gás	$V_g = \frac{q_a + q_{v,c}}{\rho_g}$ (4.103)	m^3/s
V_d	Volume ocupado pelas gotas	$V_d = \left(\pi \frac{d_d^3}{6} \right) N_d$ (4.104)	m^3/s

$u_{g,y}$	Componente vertical da velocidade do gás	$u_{g,y} = u_g \sin \theta$ (4.105)	m/s
$u_{g,x}$	Componente horizontal da velocidade do gás	$u_{g,x} = u_{jet,x} = u_{jet} \cos \theta$ (4.106)	m/s

4.5 Dispersão no Nível do Solo

Quando o contorno do jato toca o solo, algumas modificações devem ser consideradas. Considera-se o modelo de Epstein *et al.* (1989) o qual admite que, após tocar o solo, a seção transversal passa a ser retangular com altura $2Y$ e largura $2R$, como pode ser observado na Figura 4.6. O jato toca o solo quando sua altura for igual ao raio vertical ($Y = R \cdot \cos \theta$).

Figura 4.6 - Esquema representativo para a seção transversal de um jato elevado e ao nível do solo.



Fonte: Adaptado de Epstein, Fauske e Hauser (1989).

Epstein *et al.* (1989) tratam a dispersão ao nível do solo da mesma forma que a dispersão elevada, exceto que as equações de momento (4.82 e 4.83) e as equações cinemáticas (4.87 e 4.88) são substituídas por equações correspondentes que consideram a compactação

gravitacional e o espalhamento lateral. Após o contato com o solo, o perímetro do jato passa a ser calculado pela Equação 107, considerando que nenhum arraste ocorre na interface jato-solo.

$$\text{Perímetro} = 4Y + \frac{A_{jet}}{2Y} \quad (4.107)$$

A meia largura do jato R no contato com o solo é calculada considerando que o perímetro e a área do jato retangular no nível do solo são iguais aos do jato circular elevado. De acordo com Epstein *et al.* (1989), isso garante que a massa total dentro do jato seja conservada e que a continuidade e suavidade da concentração e temperatura com a distância sejam preservadas. Haverá uma descontinuidade em R .

A equação de momento na direção axial torna-se:

$$\frac{dP_x}{ds} = u_w \frac{dq_a}{ds} - g[(\rho_{jet} - \rho_{a,\infty})A_{jet}Y] \quad (4.108)$$

Considerando que a densidade varia apenas com a temperatura, a Equação 4.108 pode ser reescrita como:

$$\frac{dP_x}{ds} = u_w \frac{dq_a}{ds} - g(\rho_{jet} - \rho_{a,\infty}) \left(\frac{dA_{jet}}{ds} Y + \frac{dY}{ds} A_{jet} \right) \quad (4.109)$$

A equação de momento aplicada as bordas laterais do jato é:

$$\frac{dP_z}{ds} = g[(\rho_{jet} - \rho_{a,\infty})(2Y)^2] \quad (4.110)$$

O movimento da interface do material representado pela borda lateral do jato é dado pela condição cinemática apresentada na Equação 4.111.

$$u_{jet} \frac{dR}{ds} = u_{ent} + u_{spread} \quad (4.111)$$

Onde u_{ent} é a velocidade de arraste do ar ambiente obtido pela divisão da Equação 4.85 pelo produto $\text{Perímetro} \times \rho_{a,\infty}$. Observe que o termo $2\pi R_{jet}$ nessa mesma equação corresponde ao perímetro para jato com seção transversal circular e deve ser substituído pela Equação 4.107 para dispersão ao nível do solo.

A velocidade de espalhamento é obtida com base na Equação 4.112.

$$u_{spread} = \frac{P_z}{q_{jet}} \quad (4.112)$$

Sendo a área da seção retangular $A_{jet} = 4YR$, a variação da altura Y para um jato se dispersando no solo é obtida pela Equação 4.113.

$$\frac{dY}{ds} = \frac{Y}{A_{jet}} \frac{dA_{jet}}{ds} - \frac{4Y^2}{A_{jet}} \left(\frac{u_{ent} + u_{spread}}{u_{jet}} \right) \quad (4.113)$$

O termo correspondente a variação da área em relação à posição curvilínea dA_{jet}/ds , é obtido conforme a Equação 4.114, considerando que $q_{jet} = \rho_{jet} u_{jet} A_{jet}$. A variação da massa total do jato é obtida a partir da Equação 4.80.

$$\frac{dA}{ds} = \frac{\frac{1}{\rho_{jet}} \frac{dq_{jet}}{ds} - \frac{du_{jet}}{ds} A}{u_{jet}} \quad (4.114)$$

A variação do fluxo de momento total para jato se dispersando no solo passa a ter a contribuição do momento lateral (Equação 4.115) e a variação da velocidade do jato com a posição curvilínea pode ser obtida considerando o balanço de momento (veja a Equação 4.96), o que resulta na Equação 4.116.

$$\frac{dq_M}{ds} = \frac{dP_x}{ds} \cos \theta + \frac{dP_y}{ds} \sin \theta + \frac{dP_z}{ds} \left(\frac{v_{spread}}{u_{jet}} \right) \quad (4.115)$$

$$\frac{du_{jet}}{ds} = \frac{1}{q_{jet}} \left[\frac{dP_x}{ds} \cos \theta + \frac{dP_y}{ds} \sin \theta + \frac{dP_z}{ds} \left(\frac{v_{spread}}{u_{jet}} \right) - \frac{dq_{jet}}{ds} u_{jet} \right] \quad (4.116)$$

A trajetória da linha central agora possui três coordenadas sendo Y a coordenada vertical. As coordenadas axial e lateral são obtidas através das Equações 4.117 e 4.118.

$$\frac{dX}{ds} = 1 \quad (4.117)$$

$$\frac{dZ}{ds} = \frac{u_{spread}}{u_{jet}} \quad (4.118)$$

As Equações 4.112, 4.114, 4.115, 4.116 e 4.118 foram deduzidas para aplicação do modelo, não são fornecidas por Epstein *et al.* (1989). Ademais, nenhuma troca de calor com o solo foi considerada.

4.6 Modelagem da Linha Central do Jato

4.6.1 Região Bifásica

Como mencionado anteriormente, a extensão da área classificada é determinada com base na concentração do componente no ar. Para esse fim, a concentração é avaliada na linha central do jato uma vez que é a região em que ela apresenta valores máximos. Duas outras variáveis também são avaliadas na linha central: a velocidade e temperatura do gás.

Essas variáveis podem ser obtidas a partir das correlações para jatos turbulentos livres uma vez que o comportamento do jato na região de *entrainment* pode ser considerado o mesmo. Sendo assim, utilizou-se o modelo de Chen e Rodi apresentado em Lees (1996). A concentração do vapor e a velocidade do gás são obtidas conforme as Equações 4.119 e 4.120, respectivamente.

$$\frac{y_{g,cent,TP}(s)}{y_{g,0}} = C_y \left(\frac{d_f}{X_{jet}} \right) \sqrt{\frac{\rho_f}{\rho_{a,\infty}}} \quad (4.119)$$

$$\frac{u_{g,cent,TP}(s)}{u_{g,0}} = C_u \left(\frac{d_f}{X_{jet}} \right) \sqrt{\frac{\rho_f}{\rho_{a,\infty}}} \quad (4.120)$$

onde $y_{g,0}$ e $u_{g,0}$ são a fração mássica (ou concentração) e velocidade iniciais. Uma vez que as equações diferenciais são aplicadas ao jato bifásico após a expansão, considera-se como inicial o ponto “f”. Nesse ponto, o componente ainda não se misturou com o ar e, portanto, a concentração é de 100% de componente no vapor ($y_{g,0} = 1$). A velocidade, por sua vez, será igual a velocidade em “f” ($u_{g,0} = u_f$). A variável d_f é o diâmetro do jato em “f”.

As constantes C_y e C_u são descritas em alguns trabalhos como constante de decaimento, podendo variar ao longo de uma gama de valores dependendo de fatores incluindo perfis de velocidade iniciais, formas de bocal e quantidade de arrasto de fluxo, próximo a saída do jato, para jatos turbulentos circulares. A constante de decaimento é frequentemente citada para ter um valor igual a 5,0 (por exemplo, Fischer *et al.*, 1979) enquanto Antoine *et al.* (2001)

sugeriram valores entre 5,1 e 6,3 (HUSSEIN *et al.* 1994, ANTOINE *et al.* 2001, XU e ANTONIA 2002, BABU e MAHESH 2004).

Uma vez que essas correlações foram desenvolvidas para situações de vazamento de gás, as constantes de decaimento sugeridas por Chen e Rodi são aplicáveis à esses casos. Embora esses modelos possam ser empregados para jatos bifásicos, é importante verificar a necessidade de ajustes ou modificações devido a presença da fase líquida. Nesse sentido, investigações realizadas durante o desenvolvimento desse estudo mostraram que ao se utilizar os valores para a constante de decaimento sugeridos por Chen e Rodi (5 para C_y e 6.2 para C_u), a concentração inicial ultrapassa o valor de 1 para uma escala de 0 à 1. Além disso, a velocidade inicial (no ponto f) seria diferente da velocidade de pós expansão (u_f), o que não pode acontecer. O mesmo ocorre para a temperatura.

Esses resultados, portanto, causam discontinuidades no modelo gerando valores de concentração e velocidade na linha central diferentes para a posição inicial considerada. Acredita-se que o motivo possa estar no fato de que para jatos de gás não há uma fase de expansão caracterizada pelo fenômeno *flashing* e os valores iniciais para as referidas variáveis são tomados no ponto de liberação.

Uma alternativa utilizada para determinar essas variáveis foi considerar a velocidade e concentração máximas em “f”, iguais a velocidade e concentração médias no mesmo ponto. Isso implica que o raio em “f” não é grande o suficiente para causar diferença significativa nos valores radiais. Sendo assim, as constantes foram determinadas conforme a Equação 4.121 onde X_0 é igual a origem virtual ($X_0 = 5R_f \sqrt{\rho_f / \rho_{a,\infty}}$).

$$C_y = C_u = \frac{1}{\left(\frac{d_f}{X_0}\right) \sqrt{\frac{\rho_f}{\rho_{a,\infty}}}} \quad (4.121)$$

Para o cálculo da temperatura do gás na linha central utilizou-se o princípio de normalização de Thring e Newby (KATAOKA *et al.*, 1982; ILANGOVA, 2016), ainda aceito atualmente. No entanto, Thring e Newby aplicaram a formulação à jatos de gás em campo distante e, de acordo com os testes realizados na elaboração desse trabalho, a razão de normalização de Thring e Newby não pode ser aplicada à região bifásica.

Afim de se obter uma razão aplicável a essa região, utilizou-se o conceito de normalização mínimo-máximo que obedece a Equação geral 4.122.

$$X_N = \frac{X - X_{min}}{X_{máx} - X_{min}} \quad (4.122)$$

onde X_N assume valores entre 0 e 1. X_{min} e $X_{máx}$ são os valores mínimo e máximo da variável a ser normalizada (X).

O comportamento do perfil de temperatura na linha central na região bifásica é bem conhecido, pois a evaporação das gotas influencia de tal forma que a temperatura diminui. Dado que o perfil é decrescente, a maior temperatura que o gás pode atingir é aquela do ponto “f”, ou seja, a temperatura de bolha do componente puro, sendo assim $X_{máx} = T_b$. A menor temperatura que o gás pode atingir, teoricamente, é a de bulbo úmido da fase líquida, porém, ela atinge mínimos locais à medida que o gás se dispersa. Dessa forma, o valor mínimo (local) que a temperatura pode atingir é igual a temperatura da gota na mesma posição ($X_{min} = T_d$).

Finalmente, a temperatura do gás na linha central para a região bifásica é obtida a partir da Equação 4.123. A constante C_T também é calculada com base na Equação 4.121.

$$\frac{T_{g,cent,TP} - T_d}{T_b - T_d} = C_T \left(\frac{d_f}{X} \right) \sqrt{\frac{\rho_f}{\rho_{a,\infty}}} \quad (4.123)$$

4.6.2 Região Monofásica

Nesse caso, a velocidade e concentração seguem o mesmo procedimento explicado no tópico anterior, utilizando como base as Equações 4.119 e 4.120 que são modificadas para as Equações 4.124 e 4.125. A constante de decaimento é então obtida pela Equação 4.126.

$$\frac{y_{g,cent,MP}(S)}{y_{g,cent,TP}} = C_{y,MP} \left(\frac{d_{jet}}{X_g} \right) \sqrt{\frac{\rho_{jet}}{\rho_{a,\infty}}} \quad (4.124)$$

$$\frac{u_{g,cent,MP}(S)}{u_{g,cent,TP}} = C_{u,MP} \left(\frac{d_{jet}}{X_g} \right) \sqrt{\frac{\rho_{jet}}{\rho_{a,\infty}}} \quad (4.125)$$

$$C_{y,MP} = C_{u,MP} = \frac{1}{\left(\frac{d_{jet}}{X_{g,0}} \right) \sqrt{\frac{\rho_{jet}}{\rho_{a,\infty}}}} \quad (4.126)$$

O perfil de temperatura na região monofásica é calculado utilizando o princípio de normalização de Thring e Newby, uma vez que o mesmo foi desenvolvido para jatos de gás. Assim, $T_{g,cent,MP}$ é obtida conforme a Equação 4.127.

$$\frac{T_{g,cent,MP} - T_a}{T_g - T_a} = C_{T,MP} \left(\frac{d_{jet}}{X_g} \right) \sqrt{\frac{\rho_{jet}}{\rho_{a,\infty}}} \quad (4.127)$$

Para o cálculo da constante de decaimento $C_{T,MP}$, aplicou-se os valores iniciais (*inputs*) de cada variável na Equação 4.127 e isolou-se matematicamente a constante $C_{T,MP}$, como pode ser observado na Equação 4.128. Os resultados gerados pela modelagem da região bifásica são os *inputs* da região monofásica. Assim, $y_{g,cent,TP}$, $u_{g,cent,TP}$, $T_{g,cent,TP}$, T_g , d_{jet} , $s_{g,0}$, $\theta_{g,0}$ e $\rho_{g,jet}$ assumem os respectivos valores correspondentes ao ponto “j”.

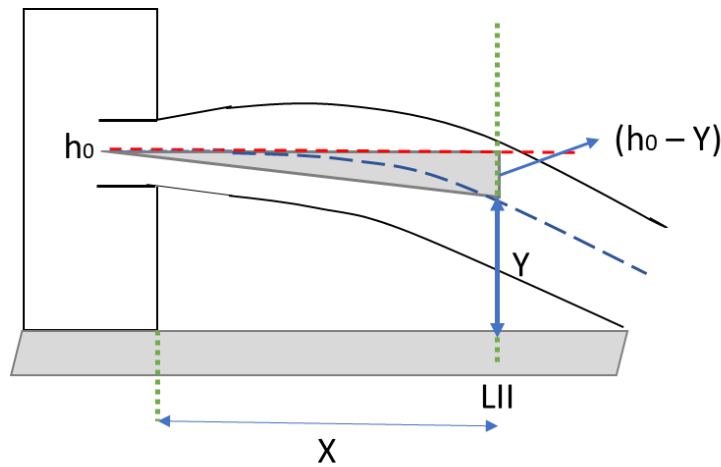
$$C_{T,MP} = \left(\frac{T_{g,cent,TP} - T_a}{T_g - T_a} \right) / \left[\left(\frac{d_{jet}}{X_{g,0}} \right) \sqrt{\frac{\rho_{jet}}{\rho_{a,\infty}}} \right] \quad (4.128)$$

4.7 Extensão da Área Classificada

A extensão da área classificada é obtida com base no perfil da linha central de concentração do gás, obtido pelas Equações 4.119 e 4.124, através do qual se avalia a posição (X) na qual o LII se encontra. A Figura 4.7 apresenta um esquema de referência para determinação da extensão. Observa-se que no LII a linha central apresenta uma altura (Y) menor que a altura de liberação (h_0), o que configura uma trajetória de queda do jato. Nesse ponto, a extensão não será igual à posição horizontal da linha central (X) devido à inclinação. Verifica-se ainda que um triângulo retângulo é formado ao ligar-se o ponto de liberação, o ponto onde se encontra o LII e o ponto em uma linha horizontal imaginária na mesma posição. Considerando a hipotenusa desse triângulo, a extensão é então obtida a partir da Equação 4.129.

$$Extensão = \sqrt{(h_0 - Y)^2 + X^2} \quad (4.129)$$

Figura 4.7 - Esquema de referência para determinação da extensão da área classificada.



Fonte: Elaborado pelo autor.

4.8 Isolinhas

Frequentemente, o limite da nuvem definido por uma concentração fixa é necessário pois é através desses limites que se obtém o volume de risco, importante variável na classificação de áreas. A linha que conecta os pontos de igual concentração em torno da fronteira da nuvem é chamada de isolinha.

Crowl e Louvar (2011) apontam que, para uma concentração específica, as isolinhas podem ser calculadas dividindo a equação da concentração da linha central pela equação da concentração radial. Sendo assim, utilizando a Equação 4.124 e a equação para concentração radial de Long apresentado em Lees (1996), o raio crítico no qual se encontra a concentração de interesse é determinado com base na Equação 4.130. É a partir do raio crítico que se gera as isolinhas.

$$R_c = \frac{s}{C_{c2}} \sqrt{-\ln\left(\frac{C(x, R)}{C_{cent}(x, 0)}\right)} \quad (4.130)$$

Onde C_{c2} é uma constante proveniente da equação da concentração radial cujo valor sugerido por Long é 5, s é a distância curvilínea. $C(x, R)$ será substituída pelo valor da concentração de interesse. Nesse trabalho, as concentrações consideradas foram àquelas correspondentes ao LII, $\frac{1}{2}$ LII e $\frac{1}{4}$ LII do componente.

As isolinhas verticais são formadas considerando que o contorno inferior possui coordenada $(X, Y - R_c \cdot \cos\theta)$ e o limite superior possui coordenada $(X, Y + R_c \cdot \cos\theta)$. O contorno

inferior é limitado à zero (nível do solo). Para obtenção das isolinhas laterais substitui-se o Y por Z. Nesse último caso nenhum ângulo é considerado uma vez que a linha central não possui inclinação em relação a coordenada z.

A forma de obtenção sugerida por Crowl e Louvar (2011) gera isolinhas para a direção de vento cruzado (perpendicular à linha central) (plano (x,z)). Para jatos elevados, essa equação também pode ser aplicada para obter as isolinhas no plano vertical (x,y) uma vez que a seção transversal é circular e, portanto, o raio em qualquer direção será o mesmo.

Para jatos no nível do solo também se utilizou a Equação 4.130, porém, acredita-se que a mesma deva ser ajustada ou modificada para essa situação pois, nesses casos, os raios na direção vertical e lateral são diferentes.

4.9 Volumes Inflamáveis

A explosão de gás é reconhecida como um dos principais riscos de acidentes em instalações de processamento de produtos químicos, petróleo e gás. A consequência de uma explosão potencial de gás varia dependendo de muitos fatores, um deles é o volume da nuvem de gás inflamável o qual representa o campo de concentração variável produzido por uma liberação de gás pressurizado dentro da planta de processamento (TAM *et al.*, 2008).

A estimativa de volumes de nuvens inflamáveis foi amplamente investigada nos últimos anos, a fim de minimizar o risco de vazamentos acidentais na atmosfera. Uma abordagem comum que tem sido desenvolvida e praticada hoje é reduzir a nuvem de gás inflamável a um volume uniforme limitado pelos limites inferiores de inflamabilidade (TAM *et al.*, 2008; CORREA *et al.*, 2019).

Nesse trabalho os volumes das nuvens inflamáveis foram calculados considerando um tronco de cone para o jato elevado e tronco de pirâmide para o jato ao nível do solo, como mostra a Figura 4.8. De maneira geral, os volumes em cada seção são obtidos conforme a Equação 4.131.

$$V_{inf} = \frac{h}{3} (A_B + \sqrt{A_B A_b} + A_b) \quad (4.131)$$

Onde A_b é a área da base menor e A_B a área da base maior.

Para jato elevado, onde a seção transversal é circular, a área da base corresponde a área de um círculo. Para jato ao nível do solo, onde a seção é retangular, a área da base corresponde a área de um retângulo. Desse modo, o volume inflamável é obtido com base nas Equações 4.132 e 4.133.

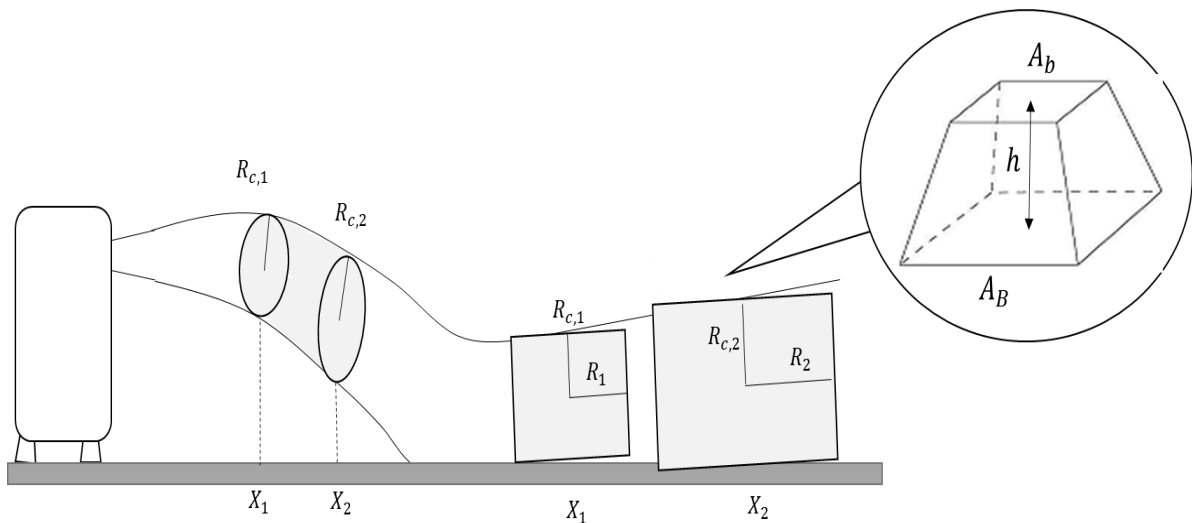
Jato Elevado:

$$V_{inf} = \sum \frac{(X_2 - X_1)\pi}{3} (R_{c,2}^2 + R_{c,2}R_{c,1} + R_{c,1}^2) \quad (4.132)$$

Nível do Solo:

$$V_{inf} = \sum \frac{4}{3} (X_2 - X_1) (R_2R_{c,2} + \sqrt{R_2R_{c,2}R_1R_{c,1}} + R_1R_{c,1}) \quad (4.133)$$

Figura 4.8 – Representação esquemática do tronco de cone e de pirâmide utilizados para cálculo do volume inflamável.



Fonte: Elaborado pelo autor.

4.10 Simulação Utilizando MATLAB

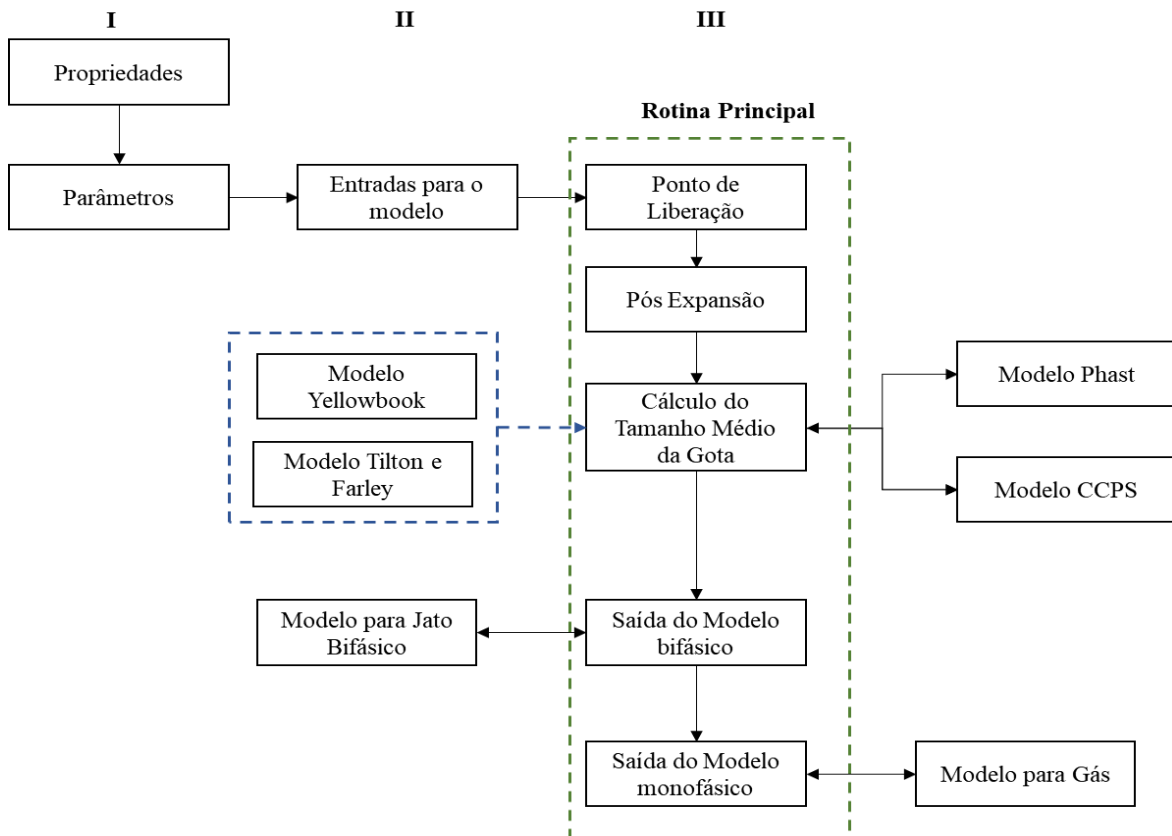
Para avaliação do modelo descrito acima utilizou-se como ambiente computacional o MATLAB (Matrix Laboratory - MATLAB®), que é um software com linguagem simples e direta que realiza cálculos de engenharia, e por isso possui uma ampla biblioteca de funções

matemáticas pré-definidas. Essas funções permitem que problemas de programação sejam resolvidos de maneira muito mais simples do que com outras linguagens computacionais (CHAIA e DAIBERT, 2013; ARAÚJO, 2020)

A implementação em ambiente MATLAB foi realizada com base no esquema delineado na Figura 4.9 e todos os scripts, ou rotinas, encontram-se no Apêndice D. Inicialmente foram criadas duas sequências de comandos (Propriedades.m e parameters.m), com a finalidade de alocar as correlações para o cálculo de propriedades de diversos componentes bem como seus respectivos parâmetros (divisão I da Figura 4.9).

Gerou-se então a rotina “Input.m” (divisão II) para inserção dos dados de entrada do problema (condições ambientes, velocidade do vento, coeficiente de descarga, condições de armazenamento, altura e diâmetro de liberação) e cálculo das condições de liberação (temperatura e pressão). O programa principal, Jet.m, (divisão III da figura) aloca a modelagem inicial (pontos de liberação e pós expansão) além do cálculo do diâmetro médio da partícula (SMD). Os modelos de Tilton e Farley (1990) e o recomendado pelo Yellow Book estão localizados dentro do programa principal devido à sua simplicidade, já os modelos do CCPS e Phast foram implementados em rotinas específicas (CCPS_diameter.m e Phast_diameter.m, respectivamente).

Figura 4.9 - Esquema de implementação do modelo em MATLAB.



As rotinas “ftwo3.m” e “gasdisp2.m” são destinadas à solução das equações algébricas e diferenciais do modelo para jato bifásico e gás, respectivamente. Para a solução da região bifásica, como forma de informar ao programa o momento no qual as iterações devem ser encerradas, criou-se um evento (myevents.m) que limita o tamanho mínimo da gota ao diâmetro molecular.

Para solução das rotinas mencionadas acima é necessário utilizar funções específicas para solução desse sistema de equações. O MATLAB possui várias funções chamadas de “ode” cujo uso irá depender do grau de dificuldade de avaliação.

Uma equação diferencial ordinária (EDO) contém uma ou mais derivadas de uma variável dependente, y , com respeito a uma única variável independente, t , geralmente referida como tempo. A notação usada aqui para representar as derivadas de y em relação a t é y' para uma primeira derivada. As “odes” solucionam problemas de valores iniciais usando a condição inicial, y_0 , bem como um período de tempo durante o qual a resposta deve ser obtida, (t_0, t_f) , a solução é obtida iterativamente (MATHWORKS).

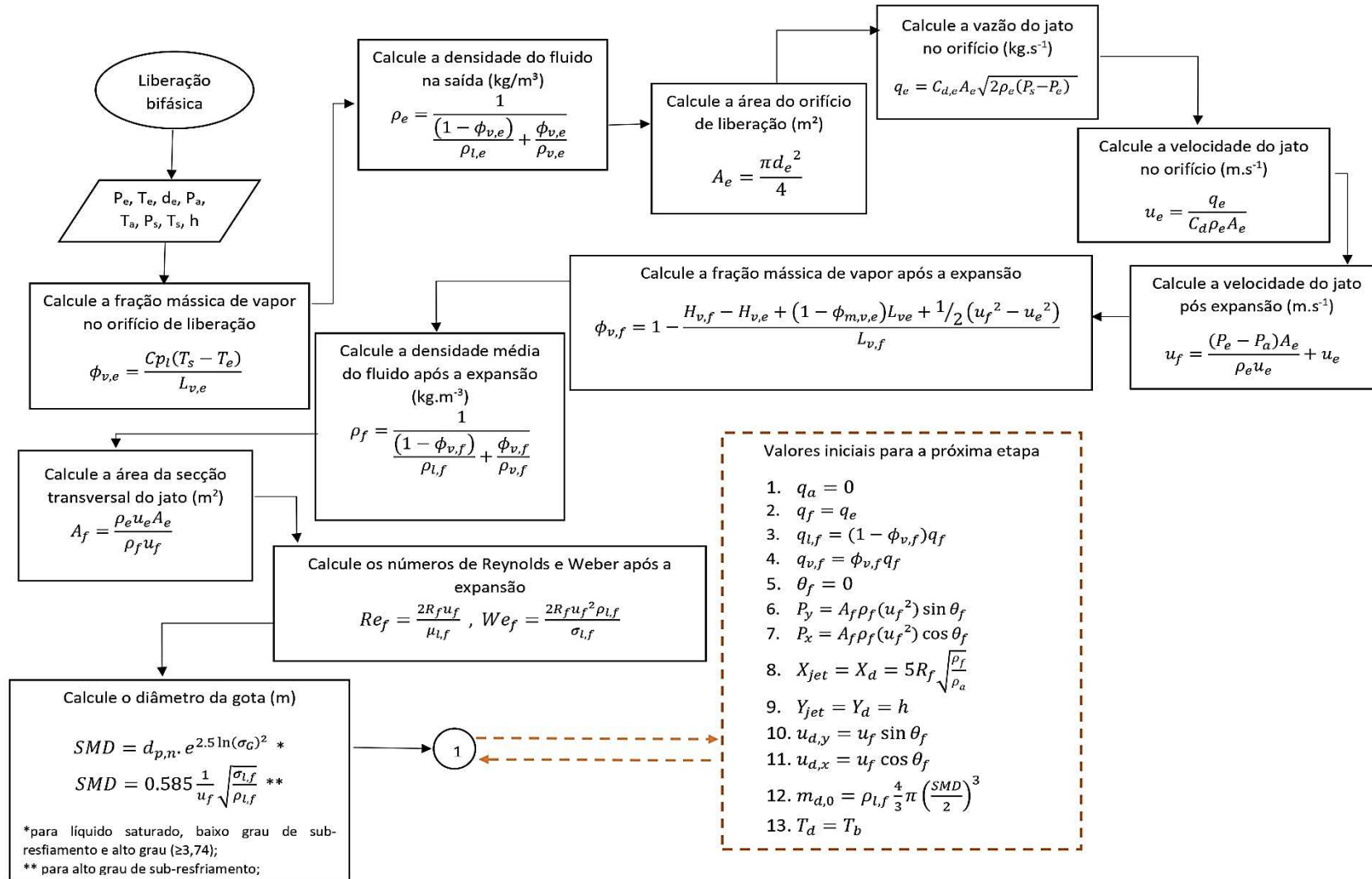
De acordo com a MathWorks, em cada etapa, o solucionador aplica um algoritmo específico aos resultados das etapas anteriores. Na primeira etapa, a condição inicial fornece as informações necessárias para que a integração prossiga. O resultado final é que o solucionador ODE retorna um vetor de etapas de tempo $t = [t_0, t_1, t_2, \dots, t_f]$ bem como a solução correspondente em cada etapa $y = [y_0, y_1, y_2, \dots, y_f]$.

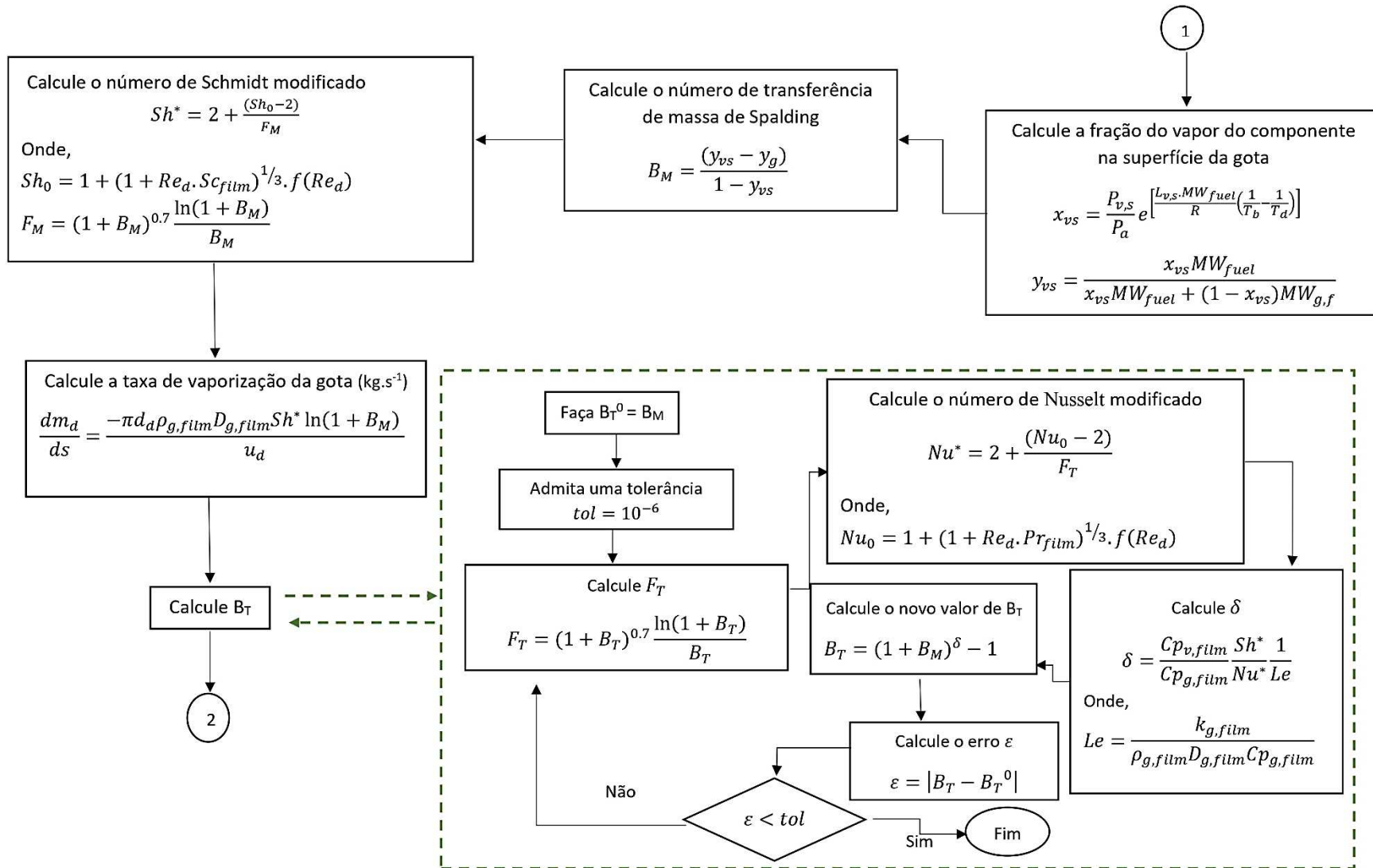
Alguns problemas de ODE apresentam dificuldade de avaliação ou rigidez. A MathWorks menciona que uma forma simplificada de se identificar um problema como rígido é avaliar se os solucionadores não rígidos (como ode45) não conseguem resolvê-lo ou são extremamente lentos. Nesse caso, aplica-se um solucionador rígido o qual melhora a confiabilidade e a eficiência da simulação.

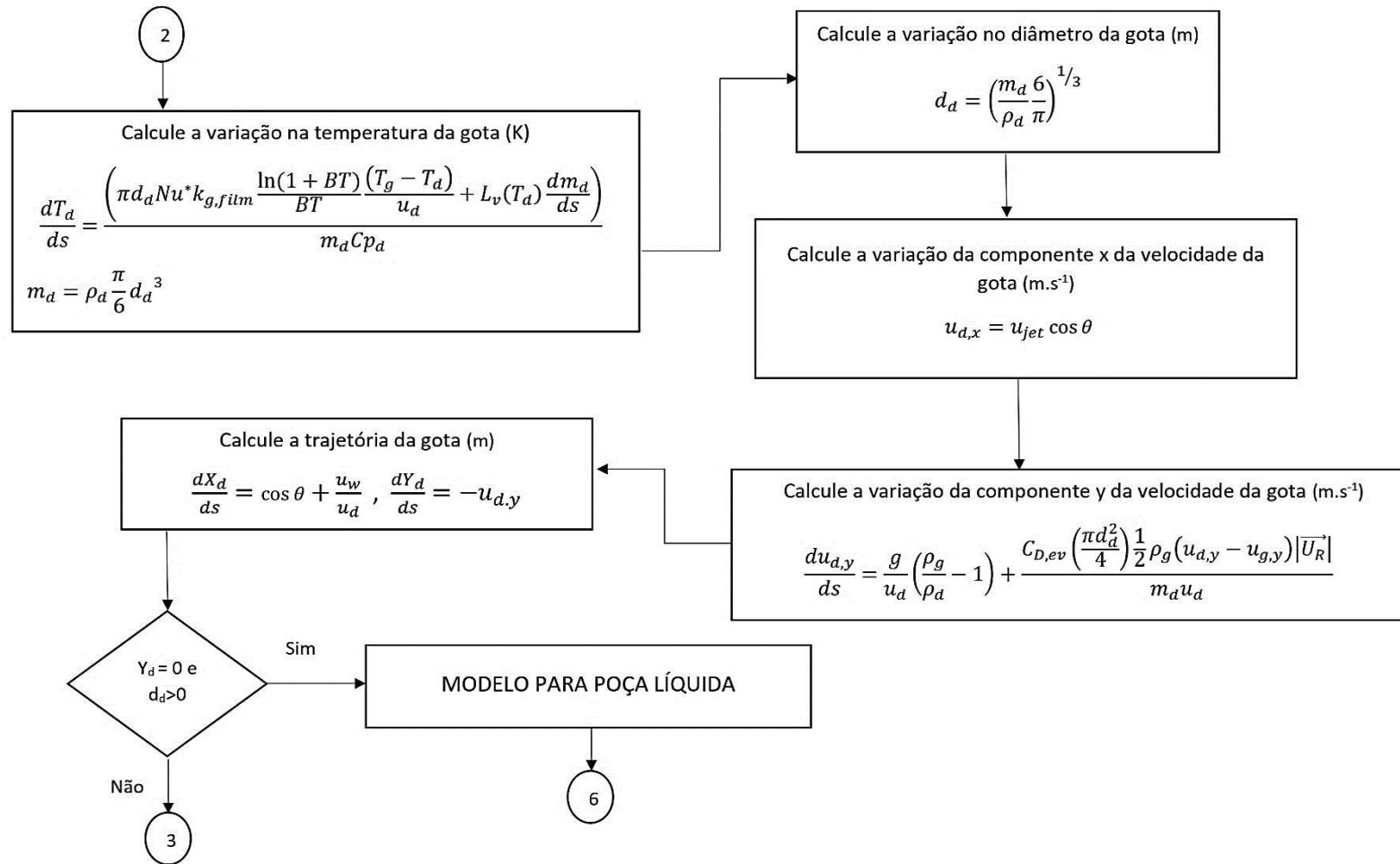
O modelo apresentado nesse trabalho é caracterizado como rígido e envolve o uso de equações algébricas. Assim, os solucionadores mais adequados são ode15s, ode23s ou ode23t. Nesse trabalho utilizou-se a função ode15s para solucionar as equações diferenciais correspondentes a região bifásica na maioria dos casos, no entanto, para casos com tamanho de gota muito pequeno, o solucionador ode23s é mais eficaz. Para região monofásica, o solucionador empregado para a maioria dos casos foi ode23t por gerar curvas mais suaves, embora ode23s também possa ser empregado.

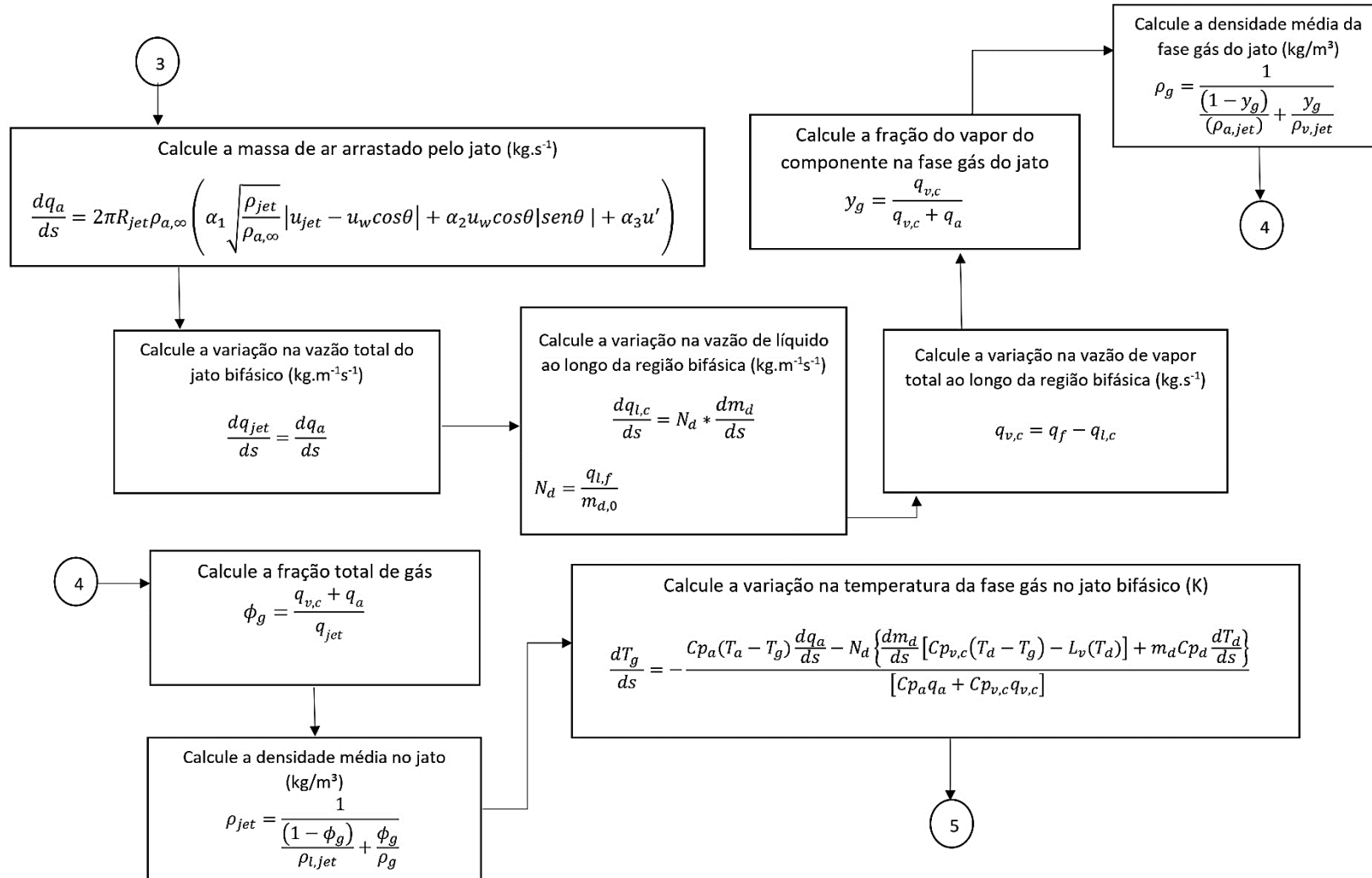
O algoritmo utilizado para implementação da metodologia proposta pode ser observado no fluxograma da Figura 4.10.

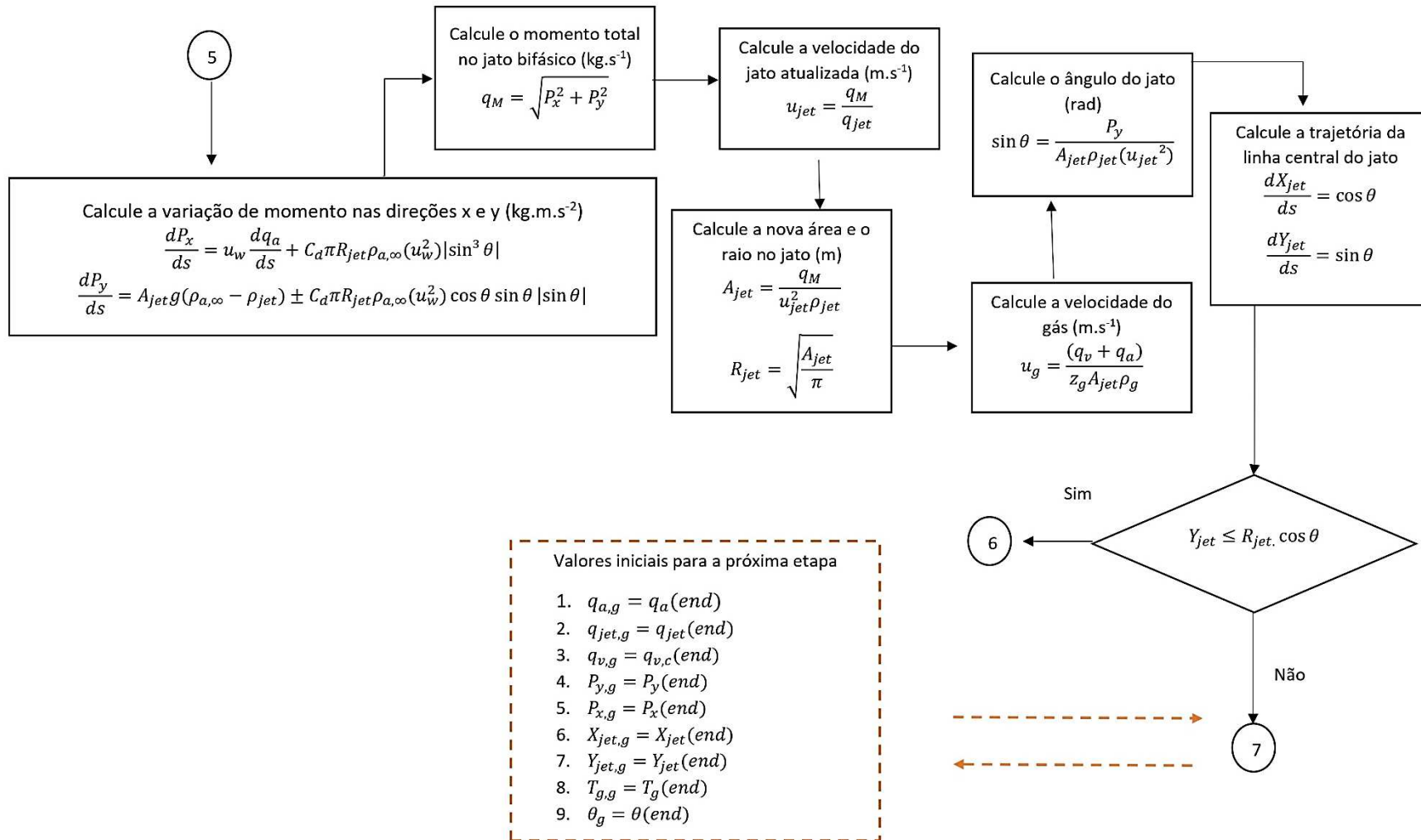
Figura 4.10 - Fluxograma para implementação do modelo.

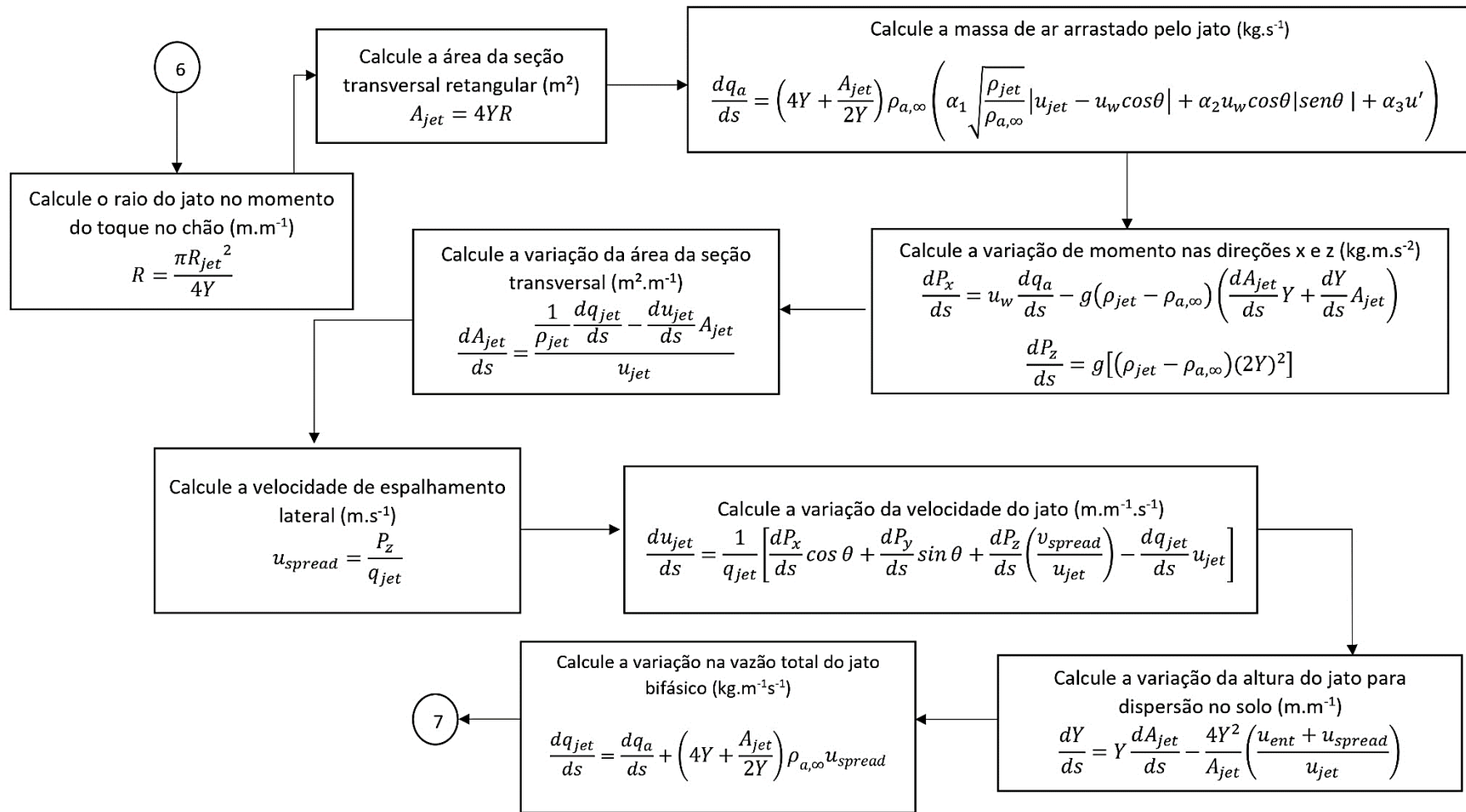


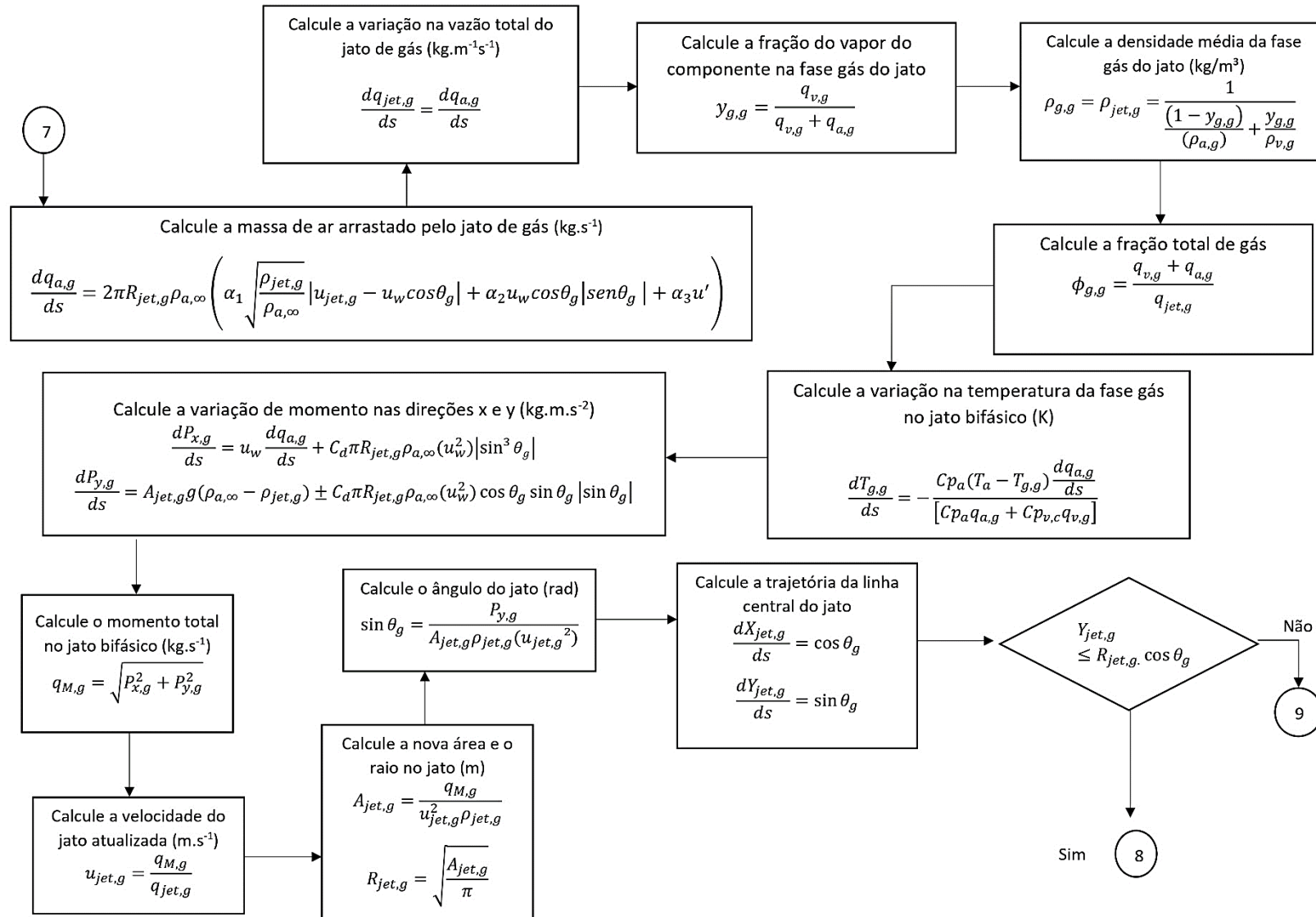


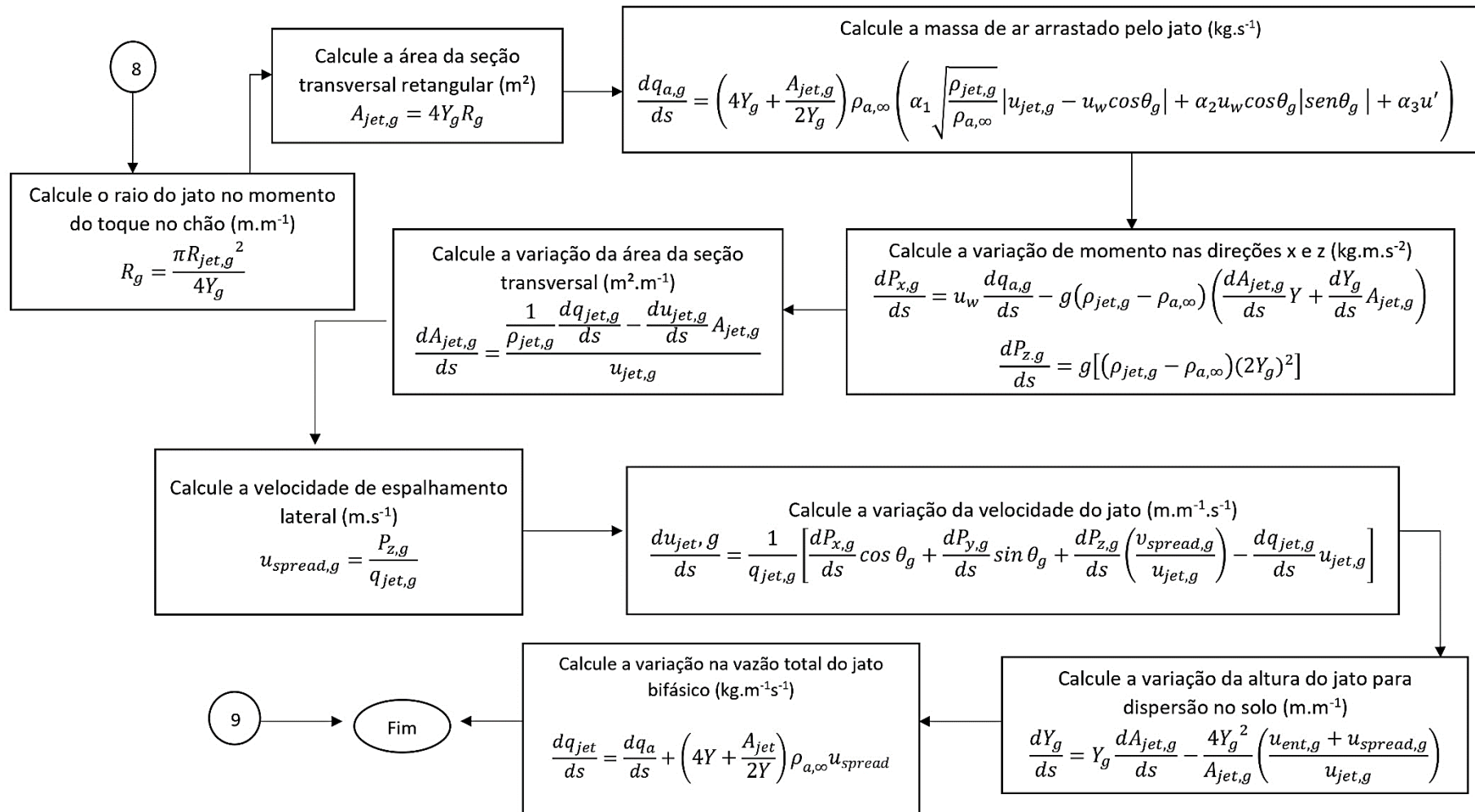












Capítulo 5

Resultados e Discussões

Aqui discutimos os resultados obtidos ao aplicar a metodologia proposta para classificação de área a estudos experimentais. Embora a metodologia possa ser aplicada em situações como a liberação acidental originada a partir de um orifício relativamente pequeno de modo que condições contínuas, isto é, quase estáveis, na saída podem ser assumidas, consideramos aqui a liberação de gás liquefeito originada do rompimento de um tubo cujo comprimento possui tamanho suficiente para que o modelo de equilíbrio homogêneo seja válido.

Numerosos estudos experimentais foram realizados para analisar liberações *flashing* e podem ser amplamente classificados em experimentos de dispersão em escala de laboratório e de campo e experimentos de descarga. Bricard e Friedel (1998) fornecem uma visão geral dos experimentos de dispersão e também das várias abordagens para as modelagens em uso na época.

Para testar o modelo, utilizou-se os resultados experimentais do projeto FLIE (*Flashing Liquids in Industrial Environments*) realizado pelo instituído francês INERIS, de Allen (1995) e Coldrick (2016). Esses estudos são detalhados nos tópicos seguintes.

Uma observação importante que deve ser pontuada é que para aplicação em classificação de área, os diâmetros para orifícios de vazamento devem possuir valores muito pequenos. A Petrobras considera um valor limite de 0.25 mm. Sendo assim, os casos apresentados são considerados de contingência e foram utilizados devido à escassez de dados experimentais disponíveis na literatura aberta.

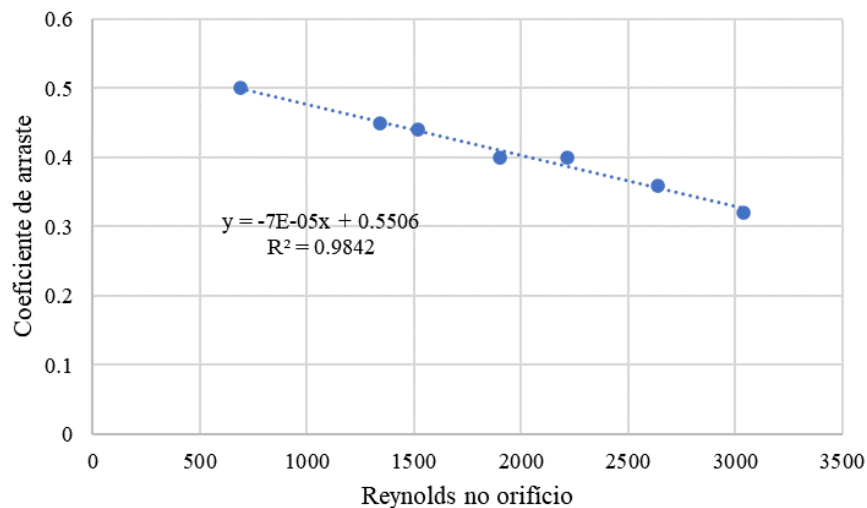
5.1 Correção do Coeficiente de Arraste para Aplicação na Região Monofásica

Durante a validação do modelo observou-se que, na região monofásica, o grau de sub-resfriamento do líquido armazenado exerce influência na quantidade de ar arrastado devido ao

momento do jato. Em outras palavras, com base nos perfis experimentais de temperatura do gás na linha central, o valor disponível na literatura para o coeficiente de arraste α_1 , presente na Equação 4.85, não gera a contribuição esperada de ar arrastado no fenômeno de troca de calor que o processo envolve. Além disso, o manual técnico do Quadvent 2 (2016) considera esse parâmetro como livre deixando em aberto que o coeficiente de arraste ideal pode ser diferente para um jato bifásico. Assim, esse parâmetro foi ajustado de maneira a aprimorar os resultados em face dos dados experimentais utilizados.

De acordo com estudos anteriores (RICOU e SPALDING, 1961), sabe-se que o coeficiente de arraste varia com o número de Reynolds no orifício ($Re_{orifício}$). Assim, a técnica utilizada nesse trabalho compreende o cálculo de $Re_{orifício}$ para cada caso e a obtenção dos valores para α_1 que, em posse dos resultados obtidos pelo modelo, melhor fornecesse um ajuste aos dados experimentais. A partir da Figura 5.1, que mostra o resultado desse ajuste, verifica-se que para casos com alto grau de sub-resfriamento, α_1 é determinado de acordo com a Equação 5.1.

Figura 5.1 - Ajuste do coeficiente de arraste ao número de Reynolds no orifício para os casos experimentais estudados.



$$\alpha_1 = 0,5506 - 7 \times 10^{-5} Re_{orifício} \quad (5.1)$$

Para os casos com baixo grau de sub-resfriamento ou de líquido saturado, α_1 assume o valor sugerido por Ricou e Spalding (1961). Os resultados obtidos para o coeficiente de arraste bem como o estado de armazenamento do líquido e o grau de sub-resfriamento, caso se

enquadre, são exibidos na Tabela 5.1. Como pode ser observado, a maioria dos casos são classificados como líquidos com alto grau de sub-resfriamento. Mais detalhes sobre os casos experimentais são apresentados nas seções 5.3 e 5.5.

Tabela 5.1 - Coeficiente de arraste e estado do líquido.

Caso		α_1	Estado	Grau
Allen (1995)		0.0806	Saturado	-
INERIS - FLIE	Caso 1	0.0806	Sub-resfriado	Baixo
	Caso 2	0.4442	Sub-resfriado	Alto
	Caso 3	0.3955	Sub-resfriado	Alto
	Caso 4	0.3379	Sub-resfriado	Alto
	Caso 5	0.3659	Sub-resfriado	Alto
	Caso 6	0.4176	Sub-resfriado	Alto
	Caso 7	0.4569	Sub-resfriado	Alto
	Caso 8	0.5023	Sub-resfriado	Alto

5.2 Avaliação dos Modelos para o Diâmetro Médio das Gotas

Como mencionado anteriormente, quatro modelos foram considerados afim de analisar o que forneceria o melhor resultado de tamanho médio de gota (SMD). A análise consistiu em calcular o diâmetro e após verificar a extensão da região bifásica.

De acordo com Allen (1995), a temperatura mínima atingida pelo perfil de temperatura do gás na linha central, coincide com o limite de existência de gotas. Dessa forma, uma vez que o perfil experimental é conhecido, foi possível obter a extensão bifásica experimental e compará-la aos resultados gerados por cada modelo. A Tabela 5.2 mostra os diâmetros obtidos e a Tabela 5.3 apresenta as comparações entre as extensões da região bifásica atingidas por cada modelo e a identificada a partir do perfil experimental.

O modelo do Phast classificou como quebra mecânica apenas os casos 7 e 8, todos os demais foram classificados na região de transição. O modelo do CCPS classifica como quebra devido ao *flashing* os casos de liberação de propano (Allen (1995) e caso 1 do projeto INERIS – FLIE), os demais são identificados como quebra mecânica. De acordo com Allen (1995) e Ichard *et al.* (2009), não houve formação de poça para os casos de jatos livres de propano. Para

butano, o INERIS relatou um valor máximo de 10% para a porcentagem de chuva observado em alguns experimentos. Ichard *et al.* (2009) mencionam que, com base nas medições de tamanho de gotículas, o diâmetro médio medido foi de 156 μm para o propano e 235 μm para o butano. Salienta-se que, em razão do modelo proposto não considerar uma distribuição de tamanho para as gotas, o diâmetro médio calculado deve, além da extensão, possibilitar uma boa estimativa da ocorrência de chuva.

Verifica-se que o modelo Phast gerou os maiores tamanhos de gotas e os piores resultados de extensão da região bifásica. De acordo com Witlox *et al.* (2010), esse modelo é válido para situações com liberação de líquido metaestável na qual a pressão de liberação considerada será sempre igual a pressão ambiente. Nesse trabalho, o modelo de Leung considera que isso só ocorrerá se o fluxo for subcrítico, porém, todos os cenários analisados são categorizados como críticos. Assim, a pressão de liberação é igual a pressão crítica calculada, conforme mencionado e ilustrado na Figura 3.1. Ichard (2012) também destaca que a derivação do modelo é baseada em um conjunto particular de experimentos, portanto, sua aplicação fora da faixa de condições iniciais cobertas nos experimentos é questionável.

Tabela 5.2 - Diâmetro médio de gota obtido pelos diferentes modelos.

Caso	Diâmetro calculado (μm)			
	Phast	Yellow B.	Tilton	CCPS
Allen	576.21	13.5	25.415	25.412
Caso 1	532.76	12.05	23.673	19.044
Caso 2	1200	122.12	74.242	193.11
Caso 3	665.45	86.975	62.444	137.54
Caso 4	424.06	59.062	51.631	93.396
Caso 5	566.39	73.621	57.645	116.42
Caso 6	903.28	110.86	70.498	175.30
Caso 7	1500	154.81	83.591	244.81
Caso 8	956.6	148.38	81.835	234.63

O modelo simplificado de Tilton e Farley (1953) gerou melhores resultados para a maioria dos casos, no entanto, para os casos 4 e 5 o modelo subestima a extensão da região bifásica. Os valores obtidos a partir do modelo do Yellow Book superestimam a maioria dos casos.

O modelo CCPS fornece uma boa estimativa para o tamanho de gota para os casos de propano cuja liberação é definida como *flashing*. Para os casos 4 e 5 o modelo é o que faz a melhor estimativa. Nota-se que esses casos possuem o maior grau de sub resfriamento.

Ichard (2012) comparou os modelos do CCPS, Yellow Book e Phast aplicando-os à uma liberação de propano e observou que o modelo do CCPS gera os melhores resultados. Essa observação condiz com a obtida nesse trabalho para o caso particular de propano.

Uma vez que se analisa a eficácia do modelo com base na extensão bifásica que o diâmetro resultante gera, esse valor não necessariamente irá representar o diâmetro médio de uma situação real de vazamento no qual gotas de tamanhos variados e direções distintas serão formadas. Sendo assim, utilizou-se o modelo de Tilton e Farley para os casos com grau moderado de sub resfriamento e o modelo CCPS para os casos de liberação saturada, com baixo e elevado grau de sub resfriamento.

Tabela 5.3 - Comparação entre as extensões obtidas pelos modelos e a experimental.

Caso	Extensão (m)				Exp.
	Phast	Yellow B.	Tilton	CCPS	
Allen	4.79	0.41	0.65	0.65	0.66
Caso 1	6.59	0.76	1.15	0.99	1
Caso 2	5.89	5.10	3.52	6.95	3.3
Caso 3	6.78	4.27	3.39	6.09	3.5
Caso 4	6.64	3.66	3.38	5.04	5
Caso 5	6.69	4.18	3.58	5.84	5
Caso 6	6.55	5.03	3.64	6.85	4
Caso 7	5.38	5.76	3.81	7.02	3.5
Caso 8	4.85	4.18	2.5	6.31	2

Afim de testar o comportamento do modelo CCPS em situações de liberação de líquidos metaestáveis, considerou-se os casos apresentados na Tabela 5.4 para os quais a pressão de liberação foi definida como sendo a ambiente. O modelo do Phast foi testado para dois comprimentos de tubo para os quais o valor de 30 metros foi fornecido por Ichard *et al.* (2009) e a razão considerada foi escolhida com base no trabalho de Ichard (2012). É possível confirmar a condição de aplicabilidade desse modelo para líquidos metaestáveis, pois gera valores mais

condizentes aos esperados. Verifica-se ainda, que o modelo do CCPS é aplicável a todas as condições consideradas.

Tabela 5.4 - Diâmetro médio para situação de líquido metaestável.

Caso	Diâmetro calculado (μm)		
	Phast		CCPS
	$L/d_e = 0.1$	$L = 30$	
Caso 5	125.73	180.63	129.61
Caso 6	140.14	209.26	218.66
Caso 7	429.91	819.80	350.00
Caso 8	344.70	653.48	335.18

5.3 Allen (1995)

Em muitos estudos na literatura disponíveis para domínio público, as medições estavam preocupadas com, ou a taxa de vazamento ou a dispersão de campo distante e relativamente poucos tentaram medir as propriedades do jato perto do ponto de liberação (campo próximo). De acordo com Coldrick (2016), provavelmente, isso se deve em parte à dificuldade de fazer qualquer tipo de medições em um fluxo bifásico *flashing*. As primeiras medições nesse sentido foram realizadas por Allen (1995) que conduziu experimentos em pequena escala em jatos *flashing* de propano, em condições de saturação, através de tubos de 4 mm de diâmetro e 40 mm de comprimento. Uma das variáveis analisadas e de interesse desse trabalho é a temperatura do gás na linha central, cuja medição foi realizada usando termopares. Os detalhes do experimento são dados na Tabela 5.5 e foram obtidos a partir do relatório de dados de Allen (1995). A Tabela 5.6 apresenta os principais resultados obtidos para as etapas iniciais do processo de liberação.

Tabela 5.5 - Parâmetros para liberação de propano por Allen (1995).

Parâmetro	Valor
Componente	Propano
Diâmetro do orifício (mm)	4
Temperatura de armazenamento (K)	288.95

Pressão de armazenamento (Pa)	748510
Temperatura ambiente (K)	288.95
Vazão experimental de liberação (kg/s)	0.11 ± 0.02
Altura de liberação (m)	1

Tabela 5.6 - Resultados obtidos para as etapas iniciais.

Etapa	Variável	Valor
Orifício (ponto “e”)	Pressão	643740 Pa
	Temperatura	283.504 K
	Vazão	0.0801 kg.s ⁻¹
	Velocidade	32.8597 m.s ⁻¹
	Fração de vapor	0.0395 kg.kg ⁻¹
Pós expansão (ponto “f”)	Velocidade	117.9179 m.s ⁻¹
	Fração de vapor	0.3554 kg.kg ⁻¹
	Diâmetro expandido	11.5 mm
	Momento horizontal	9.4494 kg.m.s ⁻²
	Posição	0.0665 m

Observa-se que, ao ser liberado a uma vazão de 0.0801 kg.s⁻¹ (calculada para $C_D=1$) e uma velocidade de 32.8597 m.s⁻¹, o propano sofre uma pequena mudança de fase produzindo uma quantidade de vapor correspondente a 3.95% da massa total do componente. Após a expansão, o jato adquire uma velocidade de 117.9179 m.s⁻¹ e, devido a evaporação associada a esse processo, assume uma nova fração de vapor de 35.54%. O diâmetro expandido resultante é de 11.5 mm e o diâmetro médio das gotas é de 23.294 µm. A expansão compreende uma região de 66.5 mm de comprimento, na qual o jato possui um momento horizontal de 9.4494 kg.m.s⁻². O número de gotas totais no jato é de 1.3397e10.

Analisou-se a aplicação do modelo de Leung no cálculo da vazão de liberação e o mesmo forneceu um valor de 0.0614 kg.s⁻¹ para esse caso. A partir da Tabela 5.5 e dos valores de vazão obtidos, nota-se que o modelo proposto gera um resultado que se encontra dentro do desvio experimental considerado por Allen, o que não ocorre para o modelo de Leung.

Para os perfis na linha central, as constantes de decaimento obtidas foram de 2.5 para todas as variáveis na região bifásica e de, aproximadamente, 3.03 para a velocidade e concentração e 6.99 para a temperatura, na região monofásica. A Figura 5.2 exibe o perfil da temperatura do gás na linha central em comparação com os dados experimentais. O

comportamento apresentado é consistente com Allen (1995) apresentando uma temperatura mínima de aproximadamente $-73\text{ }^{\circ}\text{C}$ enquanto Allen obteve $-72.15\text{ }^{\circ}\text{C}$. Esse decaimento acentuado da temperatura é devido à evaporação das gotículas, criadas pela fragmentação do jato, e ao ar arrastado no jato de que, segundo Lacombe *et al.* (2020), contribui para reduzir a pressão parcial do componente liberado. Assim, o sistema formado por ar, vapor e gotas líquidas tende a atingir o equilíbrio com a diminuição da temperatura.

Ainda de acordo com Lacombe *et al.* (2020), existe uma competição entre o processo endotérmico de evaporação das gotículas e o aquecimento de todo o jato pelo ar aprisionado. O jato de spray esfria até que a vaporização do líquido não tenha mais influência no fluxo e então, a temperatura aumenta de maneira a atingir a ambiente.

O comportamento das demais variáveis na linha central são exibidos na Figura 5.3. Observa-se que em aproximadamente 4.84 metros a linha central inverte a inclinação. Isso ocorre devido ao toque do contorno do jato no chão.

Figura 5.2 - Temperatura do gás na linha central.

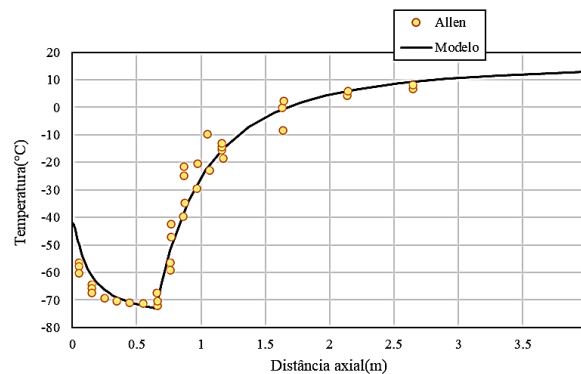
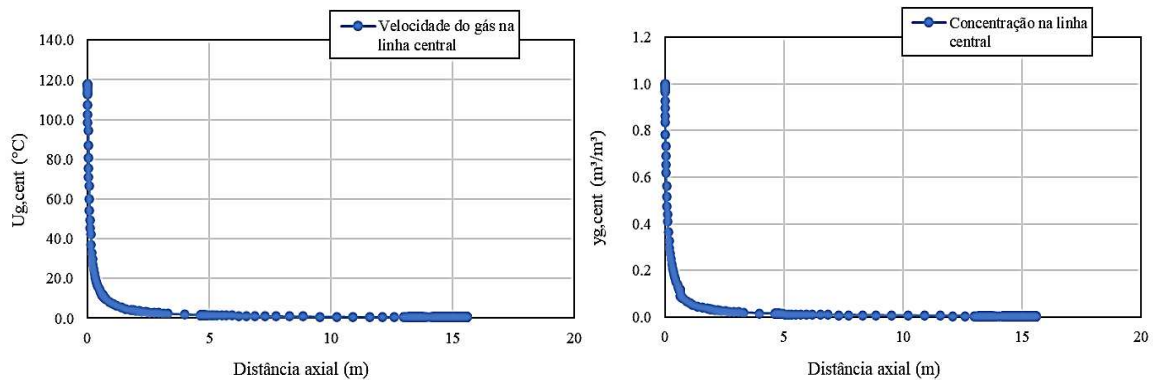
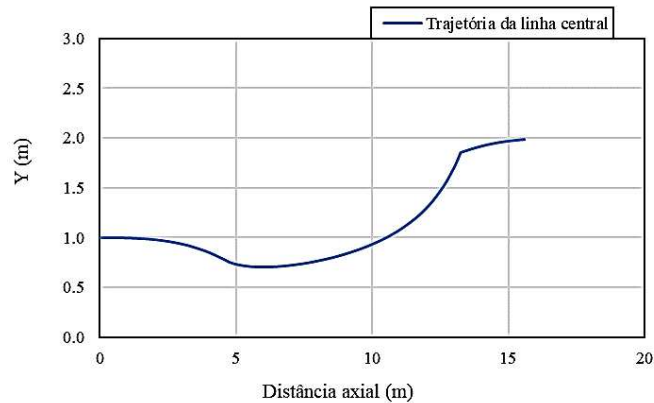


Figura 5.3 - Perfis na linha central: (a) velocidade; (b) concentração; (c) trajetória da linha central.



(a)

(b)

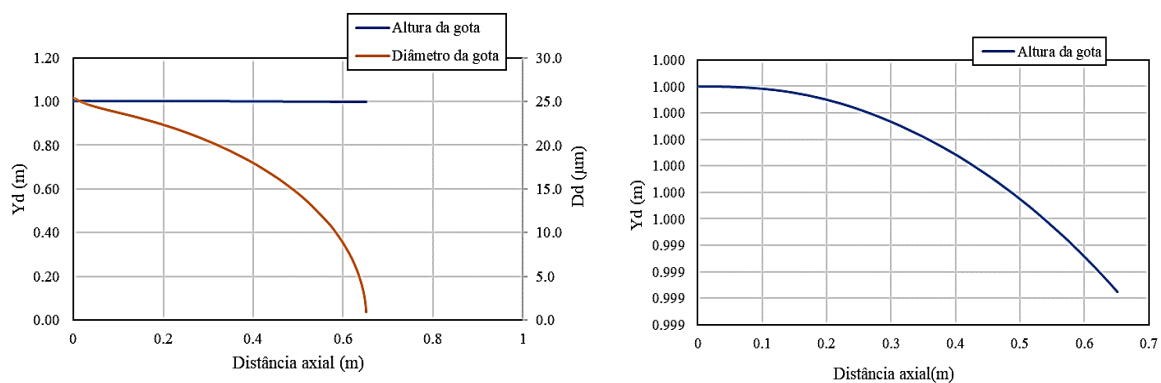


(c)

A partir do perfil de concentração pode-se estimar a extensão da área classificada. A concentração mínima para o propano é de 2.1% em volume (veja o Apêndice B) alcançada em aproximadamente 3.11 m de distância e 0.93 m de altura. De acordo com a Equação 4.129, a extensão para esse caso é de 3.11 m. O valor coincide com a distância axial pois as gotas praticamente possuem a mesma trajetória da linha central.

A ocorrência de chuva (*rainout*) é estimada avaliando-se os perfis de diâmetro e altura das gotas, se a gota atingir o chão antes que evapore completamente caracteriza-se o fenômeno de *rainout* e possível formação de poça. A Figura 5.4 apresenta os gráficos referentes a esses perfis para o caso em questão. Verifica-se que em aproximadamente 0.65 a gota evaporou completamente enquanto permanecia em uma altura correspondente à inicial. Assim, a chuva não ocorre.

Figura 5.4 - Perfis para estimativa de chuva: (a) altura; (b) diâmetro das gotas.



(a)

(b)

Os resultados correspondentes à fase líquida foram obtidos a partir de uma gota com tamanho igual ao diâmetro médio calculado. A Figura 5.5 ilustra o comportamento das variáveis

temperatura, velocidade e massa. A Figura 5.6 exibe o comportamento da temperatura média do gás obtida a partir do balanço de energia (Equação 4.91). Observa-se que o comportamento na região bifásica é diferente do comportamento da temperatura na linha central que apresenta perfil decrescente.

Figura 5.5 - Perfis típicos para gotas de propano em liberações flashing: (a) temperatura; (b) velocidade; (c) massa.

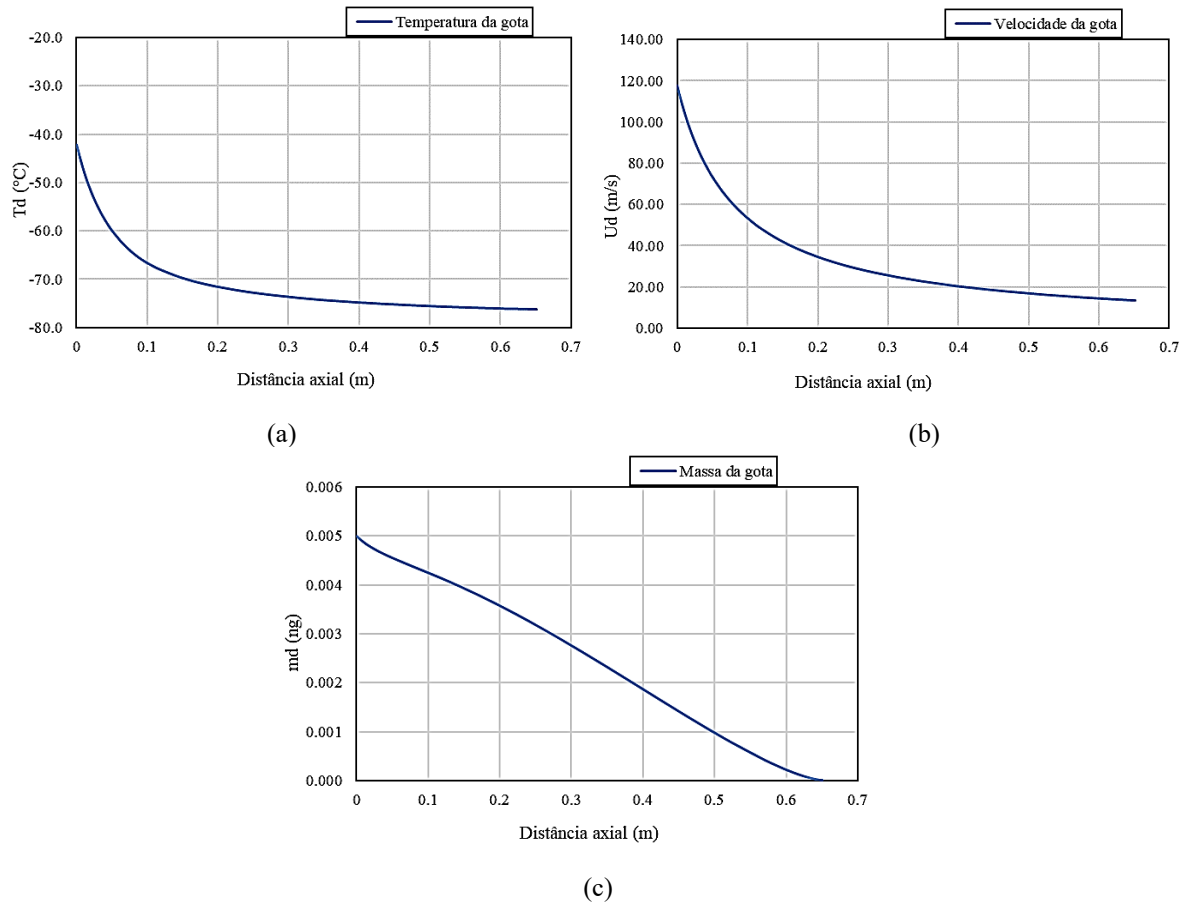
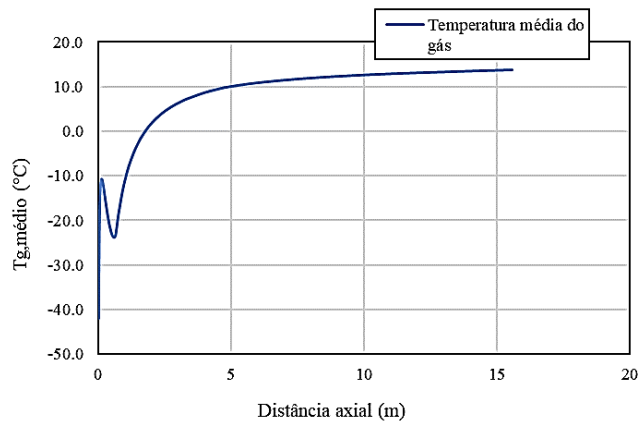


Figura 5.6 - Temperatura média do gás.



Os contornos verticais da pluma podem ser observados na Figura 5.7 onde as linhas vermelha, rosa e azul correspondem às concentrações no LII, $\frac{1}{2}$ LII e $\frac{1}{4}$ LII, respectivamente. A linha preta representa a linha central e a cor azul representa a trajetória das gotas. Verifica-se que a pluma toca o chão apenas em $\frac{1}{4}$ LII e após 10 metros começa a subir devido à proximidade da densidade do gás com o ar ambiente. A partir do resultado mostrada na Figura 5.7 os volumes inflamáveis obtidos foram

A Figura 5.8 mostra as isolinhas na direção lateral (*cross wind*) assumindo que o jato permanece no eixo de coordenada (x,y), respectivamente.

Figura 5.7 – Isolinhas na direção vertical.

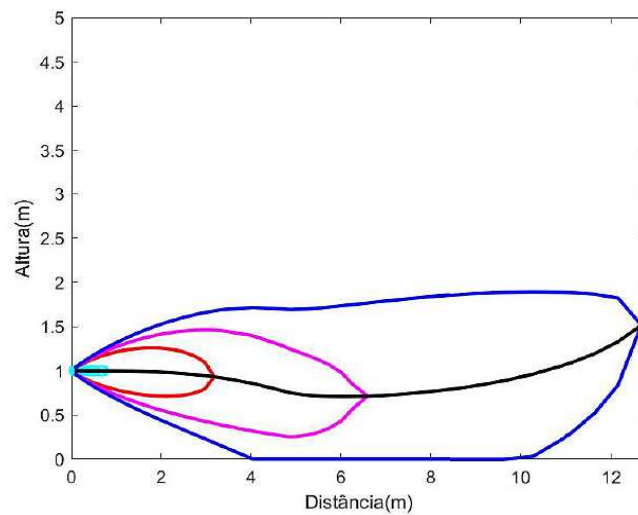
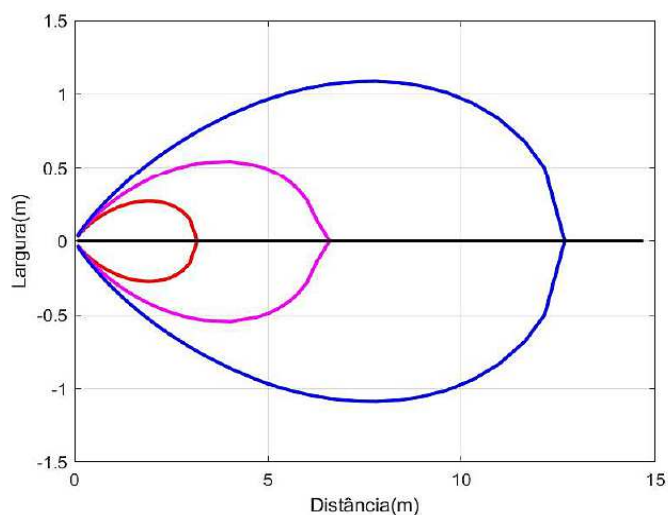


Figura 5.8 - Isolinhas laterais



5.3 Coldrick (2016)

Coldrick (2016) descreve a modelagem CFD aplicada ao estudo de Allen (1995) e previsões de modelo integral cujo resultado de interesse para esse trabalho é o obtido a partir do modelo Phast. Além do perfil de temperatura, Coldrick também gerou resultados para concentração de propano, possibilitando avaliar a extensão da área classificada obtida pelo modelo CFD e pelo modelo Phast. As Figuras 5.9 e 5.10 mostram as comparações entre esses modelos e o proposto.

Figura 5.9 - Comparação entre Coldrick e o modelo proposto para a temperatura. (a) Modelo; (b) Phast; (c) Phast com umidade; (d) Coldrick.

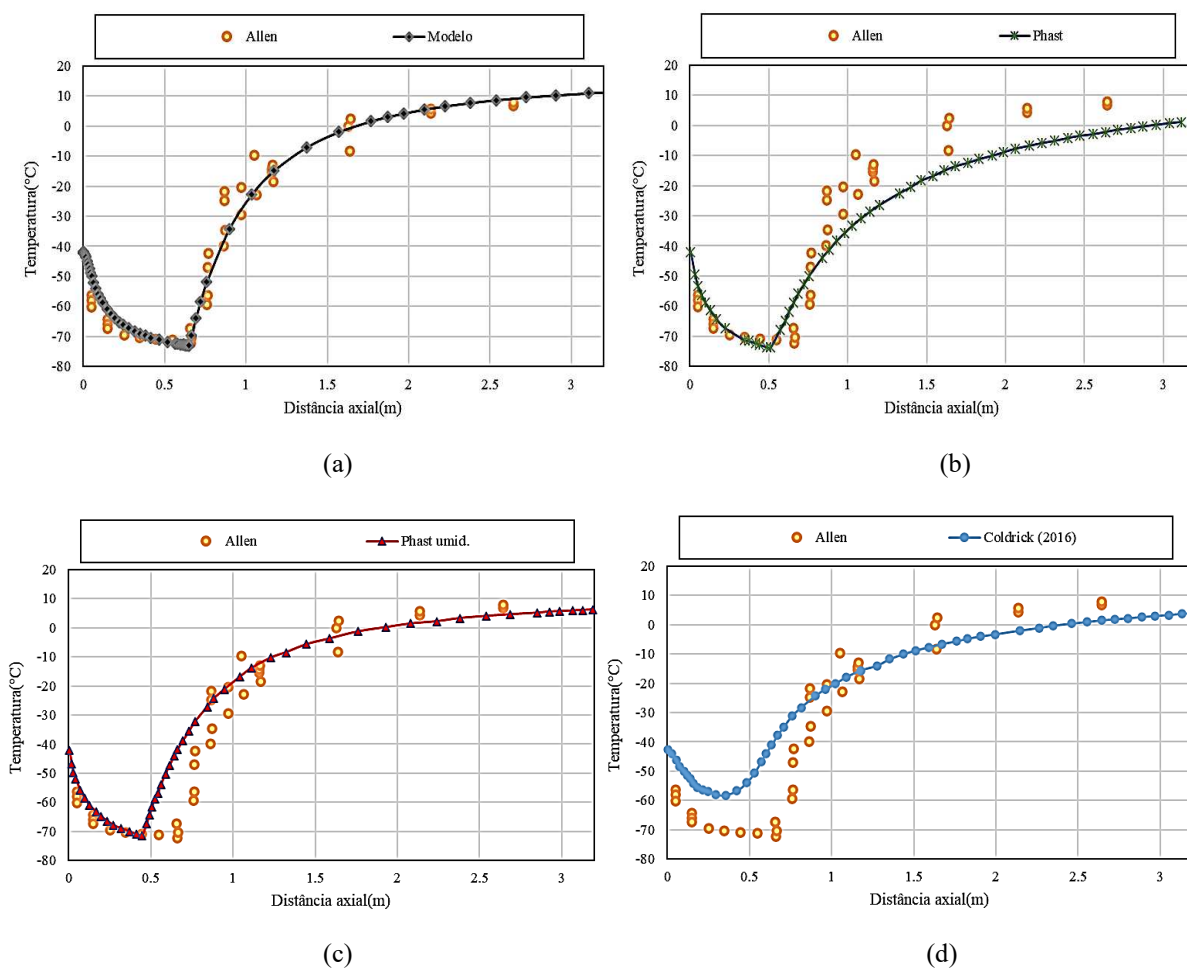
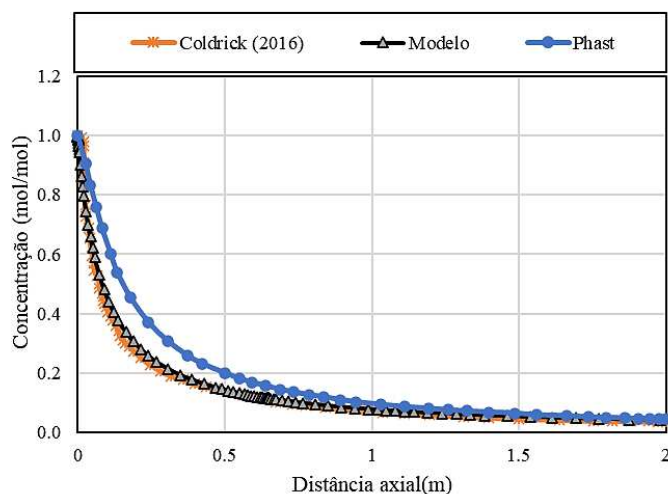


Figura 5.10 - Comparação entre Coldrick, Phast e o modelo proposto para a concentração.



É possível observar que o modelo utilizado por Coldrick não consegue atingir a temperatura mínima obtida por Allen em seus experimentos. O modelo Phast sem umidade prevê uma extensão da região bifásica menor que a experimental e apresenta uma considerável discordância em relação a região monofásica. Phast com umidade melhora a estimativa dos dados para essa região, porém, reduz ainda mais a previsão de evaporação completa das gotas. Notavelmente, o modelo proposto consegue um melhor ajuste aos dados experimentais.

Para a concentração, o resultado desse trabalho se assemelha ao obtido pelo CFD com Coldrick de forma que os perfis praticamente se sobrepõem. O modelo Phast fornece um perfil no qual a concentração possui uma diminuição mais suave, em comparação aos outros modelos, até cerca de 1 metro. Após, todos os modelos geram resultados parecidos.

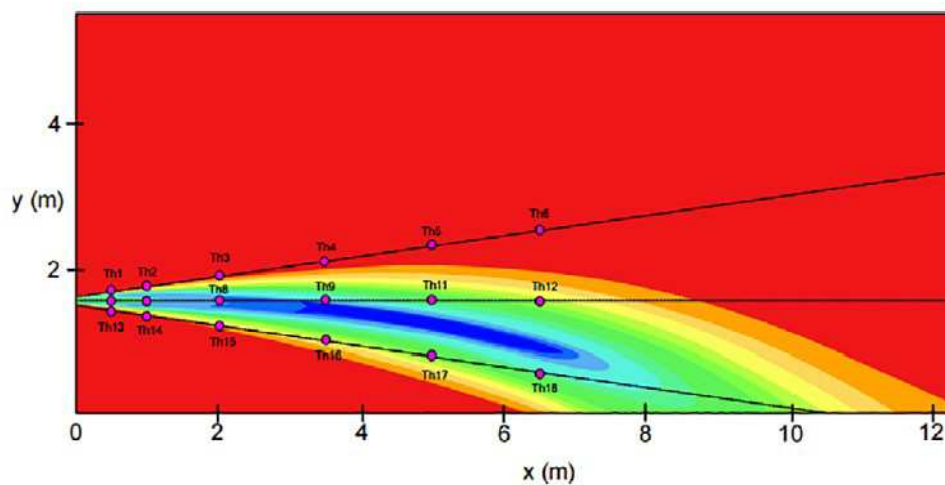
Como mencionado anteriormente, para o caso da liberação *flashing* de propano a área classificada terá uma extensão relativamente igual a distância axial. Assim, seria possível identificar as extensões obtidas por Coldrick e pelo método do Phast através do gráfico da Figura 5.9 e compará-las à obtida neste trabalho. No entanto, os dados fornecidos por Coldrick se limitam à 2 metros de distância e nesse ponto a concentração não é mínima. Para o modelo Phast, a concentração nesse ponto é de 4.6 % (mol.mol^{-1}) enquanto que para Coldrick é de 3.5 % (mol.mol^{-1}). A concentração para o modelo proposto à 2 metros de distância do ponto de expansão é de aproximadamente 3.7 % (mol.mol^{-1}), valor muito próximo ao de Coldrick. Com base nesses valores, acredita-se que a extensão obtida por esse trabalho se assemelha ao que o modelo de fluidodinâmica de Coldrick obterá caso fossem considerados mais pontos computacionais.

5.4 Projeto INERIS - FLIE

Segundo Ichard *et al.* (2009), o objetivo desses experimentos era obter uma visão das propriedades dos jatos *flashing*, características das gotículas e da temperatura e para investigar a ocorrência de *rainout* em jatos bifásicos que colidem em uma parede. Os testes foram conduzidos em grande escala e utilizaram propano e butano como componentes liberados e foram realizados ao ar livre para o qual as condições ambientais (temperatura, umidade, velocidade e direção do vento) foram medidas e registradas.

Além das condições de armazenamento (temperatura e pressão dentro do tanque), e condições de saída, ou seja, temperatura e pressão do líquido 10 cm a montante do orifício de saída, muitos outros parâmetros foram medidos durante os experimentos. As vazões mássicas foram estimadas medindo-se o peso do tanque de armazenamento durante os lançamentos. A temperatura em várias posições ao longo do eixo do jato, bem como no obstáculo no caso de jatos de impacto, foi medida com termopares. Para butano e propano, houveram seis distâncias de medição de temperatura, na direção longitudinal (até 6,5 m do local de saída) e para cada uma delas, as medições foram relatadas em três posições na direção vertical. A Figura 5.11 ilustra a posição dos termopares que foram localizados em três linhas horizontais de medições colocadas em um plano vertical que passa pelo eixo do jato: a linha superior do termopar (Th1-Th6), a linha central do termopar (Th7-Th12) e a linha inferior do termopar (Th13-Th18) (ICHARD *et al.*, 2009; LACOME *et al.*, 2019).

Figura 5.11 - Representação da posição dos termopares.



Fonte: Lacome *et al.* (2019).

As condições experimentais obtidas a partir de Ichard *et al.* (2009) e Lacomme *et al.* (2019) estão resumidas na Tabela 5.7 na qual X representa o grau de sub-resfriamento, o qual é definido conforme a Equação 5.2.

$$P_s = X \cdot P_{sat}(T_s) \quad (5.2)$$

Tabela 5.7 - Condições experimentais utilizadas pelo projeto FLIE.

Caso	Comp.	d _e (mm)	X	Armazenamento		Temp. ambiente (°C)	Vazão exp. (kg/s)
				P (Pa)	T (°C)		
1	Propano	10	1.03	957100	24	24	1.096
2	Butano	10	1.75	400550	23	23	0.7044
3	Butano	10	2.44	594580	25	25	1.0098
4	Butano	10	4	915540	23	23	1.33
5	Butano	10	3.74	760450	19.3	23	1.33
6	Butano	10	2.32	493530	20.7	25	1.01
7	Butano	10	1.72	345210	18.9	23	0.69
8	Butano	5	1.74	356090	19.5	23	0.13

Fonte: Adaptado de Lacomme *et al.* (2019) e Ichard *et al.* (2009).

A altura de liberação é de 1.5 metros para todos os casos e o coeficiente de descarga (C_D) é igual a 1 para os casos de jatos *flashing* e 0.62 para os casos em que a liberação é de líquido no orifício. Utilizou-se uma velocidade de vento na direção da liberação de 1 m/s em conformidade com Lacomme *et al.* (2019). As constantes de decaimento foram iguais a 2.5 na região bifásica para a velocidade, concentração e temperatura de todos os casos. As constantes obtidas para a região monofásica encontram-se na Tabela 5.8. Alguns dos principais resultados tais como velocidade, fração de vapor, vazão, entre outros, são exibidos na Tabela 5.10.

A pressão e temperatura na região final de expansão, como mencionado anteriormente, correspondem à pressão ambiente e temperatura de saturação do componente nessa pressão. Devido a conservação de massa, a vazão nessa região será igual a vazão de liberação.

Como visto no tópico 5.1, o caso 1 é referente a liberação de propano com baixo grau de sub-resfriamento o que a torna uma liberação do tipo *flashing*. Nesse caso, o componente evapora parcialmente no orifício e após a expansão adquire uma velocidade elevada. A vazão calculada, segundo o modelo proposto, é de aproximadamente $0.5988 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$ e utilizando o modelo de Leung a vazão obtida é de $0.4766 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$. Comparando ambos os valores com o experimental de $1.1 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$, verifica-se que o modelo gera um resultado mais próximo.

Para os demais casos, a vazão obtida condiz com a do modelo de Leung uma vez que para líquidos com alto grau de sub-resfriamento utiliza-se a equação de Bernoulli em ambos os métodos. A Tabela 5.9 mostra a comparação entre as vazões calculadas e a experimental bem como o erro relativo que o modelo possui.

Tabela 5.8 - Constantes de decaimento obtidas para a região monofásica.

Caso	Constante de decaimento		
	Velocidade	Concentração	Temperatura
1	3.14	3.14	4.86
2	3.75	3.75	5.90
3	3.59	3.59	5.27
4	3.66	3.66	6.96
5	3.75	3.75	7.63
6	3.68	3.68	5.51
7	3.84	3.84	6.18
8	4.1	4.1	8.13

Tabela 5.9 - Erro relativo para a vazão de liberação.

Caso	Vazão experimental (kg/s)	Modelo	Erro (%)
2	0.70	0.6845	2.21
3	1.01	0.9767	3.30
4	1.33	1.3691	2.94
5	1.33	1.2378	6.93
6	1.01	0.8775	13.12
7	0.69	0.6307	8.60
8	0.13	0.1613	24.08

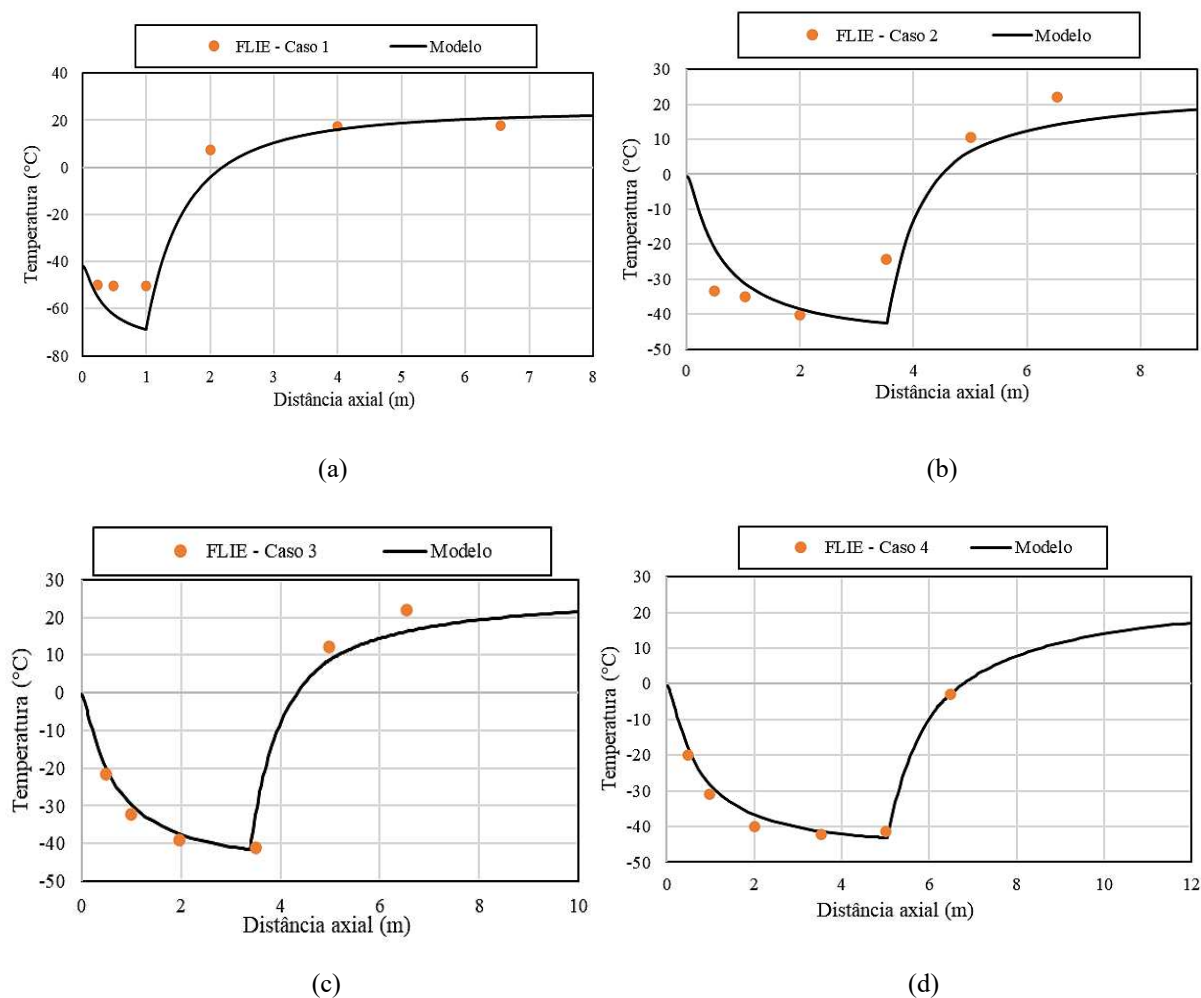
Tabela 5.10 - Principais resultados para as simulações do Projeto INERIS-FLIE.

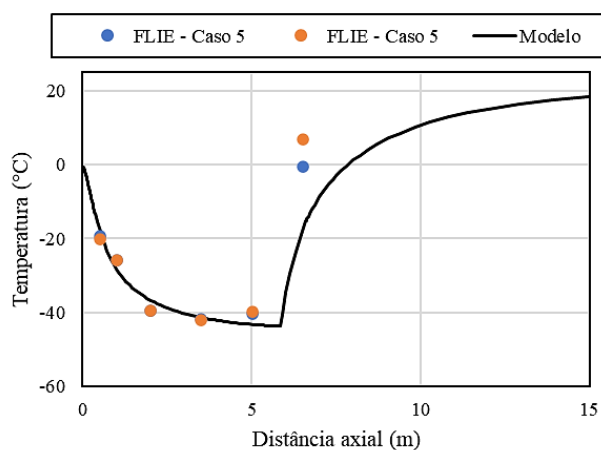
Caso	Orifício					Pós expansão					Gotas		
	P_e (bar)	T_e (°C)	$\phi_{v,e}$	u_e (m.s ⁻¹)	q_e (kg.s ⁻¹)	$\phi_{v,f}$	u_f (m.s ⁻¹)	d_f (cm)	P_x (kg.m.s ⁻²)	x_o (cm)	SMD(μm)	$m_{d,0}$ (ng)	N_d (10 ⁹ .s ⁻¹)
1	8.50	20.46	0.03	28.72	0.5988	0.42	126.6	3.30	75.81	17.8	17.457	1.623	214.91
2	2.30	23	0	24.42	0.6845	0.16	39.06	3.70	26.74	34.21	212.42	3023.4	0.19113
3	2.44	25	0	34.99	0.9767	0.17	46.44	4.23	45.35	37.60	151.29	1092.2	0.74238
4	2.30	23	0	48.85	1.3691	0.16	56.16	4.37	76.89	40.34	102.74	342.03	3.3782
5	2.03	19.3	0	43.83	1.2378	0.13	50.30	4.00	62.27	40.53	116.42	497.71	2.1621
6	2.13	20.7	0	31.16	0.8775	0.14	41.13	3.88	36.10	37.87	192.83	2261.6	0.33364
7	2.00	18.9	0	22.32	0.6307	0.13	34.69	3.42	21.88	34.84	269.29	6159.5	0.089306
8	2.05	19.5	0	22.86	0.1613	0.13	35.44	1.74	5.72	17.43	258.09	5.423	0.025824

Embora o último caso tenha gerado um erro superior a 20%, nos demais casos observa-se que as vazões calculadas geram erros pequenos em relação ao valor experimental, o que mostra que o modelo é confiável para estimativa desses valores. Essa diferença é esperada pois o modelo proposto não considera possíveis perdas por atrito.

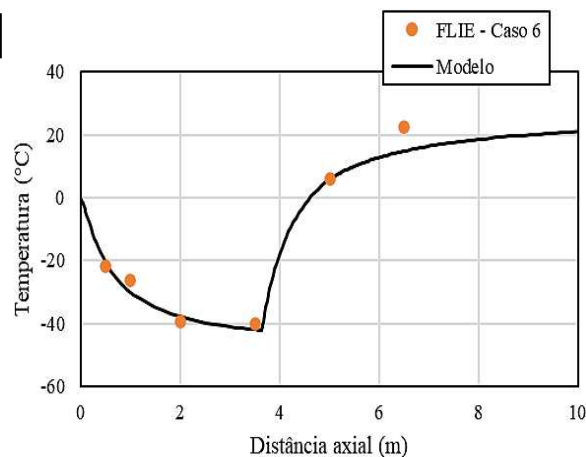
A Figura 5.12 mostra a comparação dos perfis de temperatura simulados e observados ao longo da linha central dos jatos para os oito casos descritos acima. Para o teste de propano os valores experimentais atingem uma temperatura mínima de -50°C , diferente do valor obtido por Allen. Segundo Ichard *et al.* (2009), isso ocorre pois os termopares foram saturados nesse valor. No entanto, embora os termopares estejam saturados, pode-se observar que a temperatura está caindo abaixo da temperatura de ebulição normal do propano devido à evaporação das gotículas de líquido. Nas simulações, a temperatura diminui para -73.82°C .

Figura 5.12 - Temperatura na linha central: (a) Caso 1; (b) Caso 2; (c) Caso 3; (d) Caso 4; (e) Caso 5; (f) Caso 6; (g) Caso 7; (h) Caso 8.

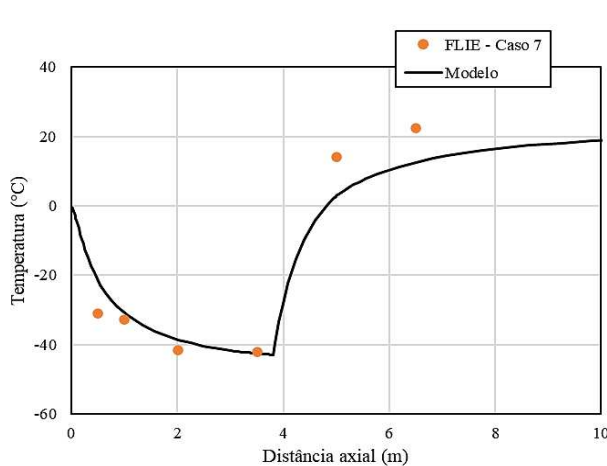




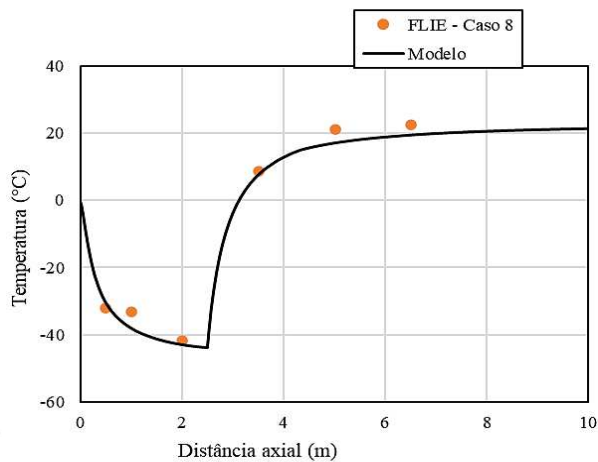
(e)



(f)



(g)



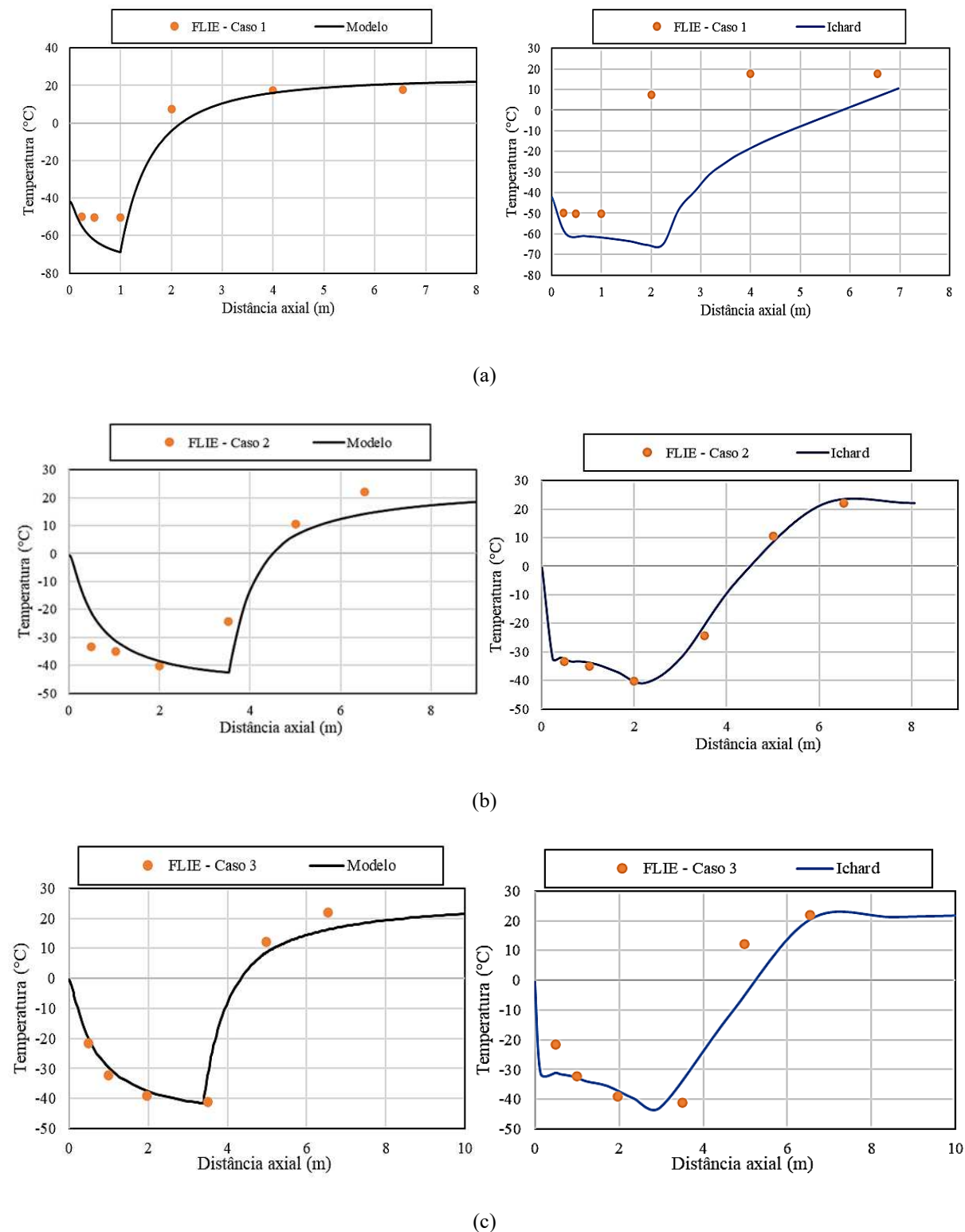
(h)

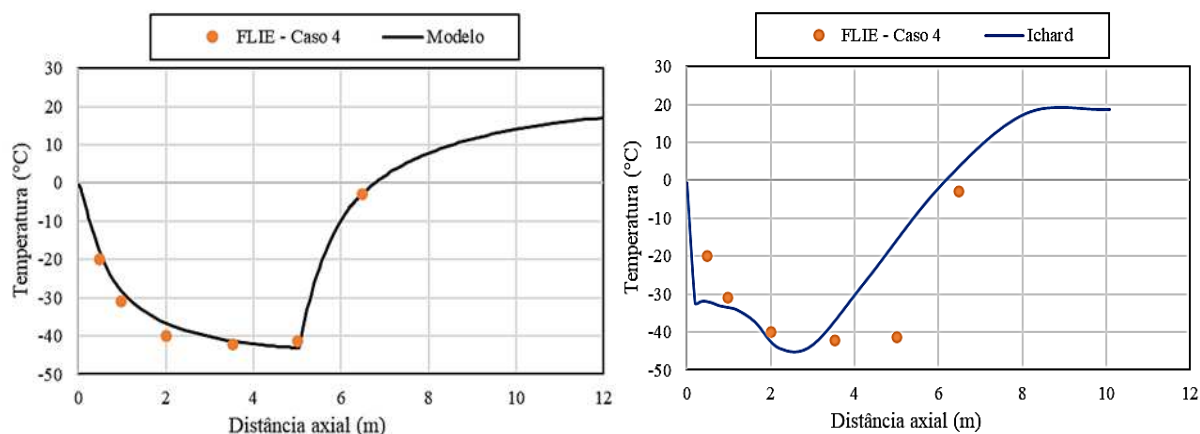
Para os testes experimentais de butano os experimentos prevêem uma temperatura mínima de aproximadamente -42°C , esse valor também está bem previsto nas simulações realizadas nesse trabalho. Na região monofásica o modelo consegue gerar um perfil coerente com o experimental exceto para os casos 5 e 7 nos quais os resultados foram os mais discordantes. Devido ao pequeno número de pontos experimentais, uma análise mais detalhada não é possível, no entanto, acredita-se que o modelo tende a se aproximar cada vez mais do perfil experimental para distâncias maiores que 10 metros.

Ichard *et al.* (2009) simularam os testes de 1 à 4 e seus resultados são comparados com os obtidos nesse trabalho, conforme mostra a Figura 5.13. Pode-se observar que os resultados obtidos a partir do modelo proposto são mais satisfatórios principalmente para os casos 1 e 4. Ichard *et al.* (2009) consideram modelo de equilíbrio térmico entre as fases porém, trata-se de uma abordagem simplificada do processo de liberação. Uma vantagem do modelo proposto é a

consideração de não-equilíbrio térmico, uma vez que reproduz com maior confiabilidade o processo de um cenário real de vazamento.

Figura 5.13 - Temperatura na linha central para o modelo proposto e Ichard *et al.* (2009): (a) Caso 1; (b) Caso 2; (c) Caso 3; (d) Caso 4.

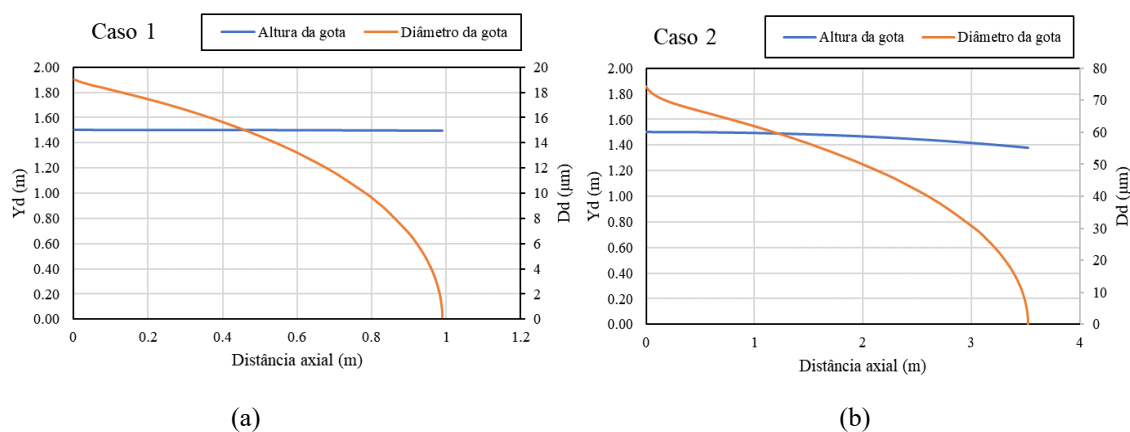




(d)

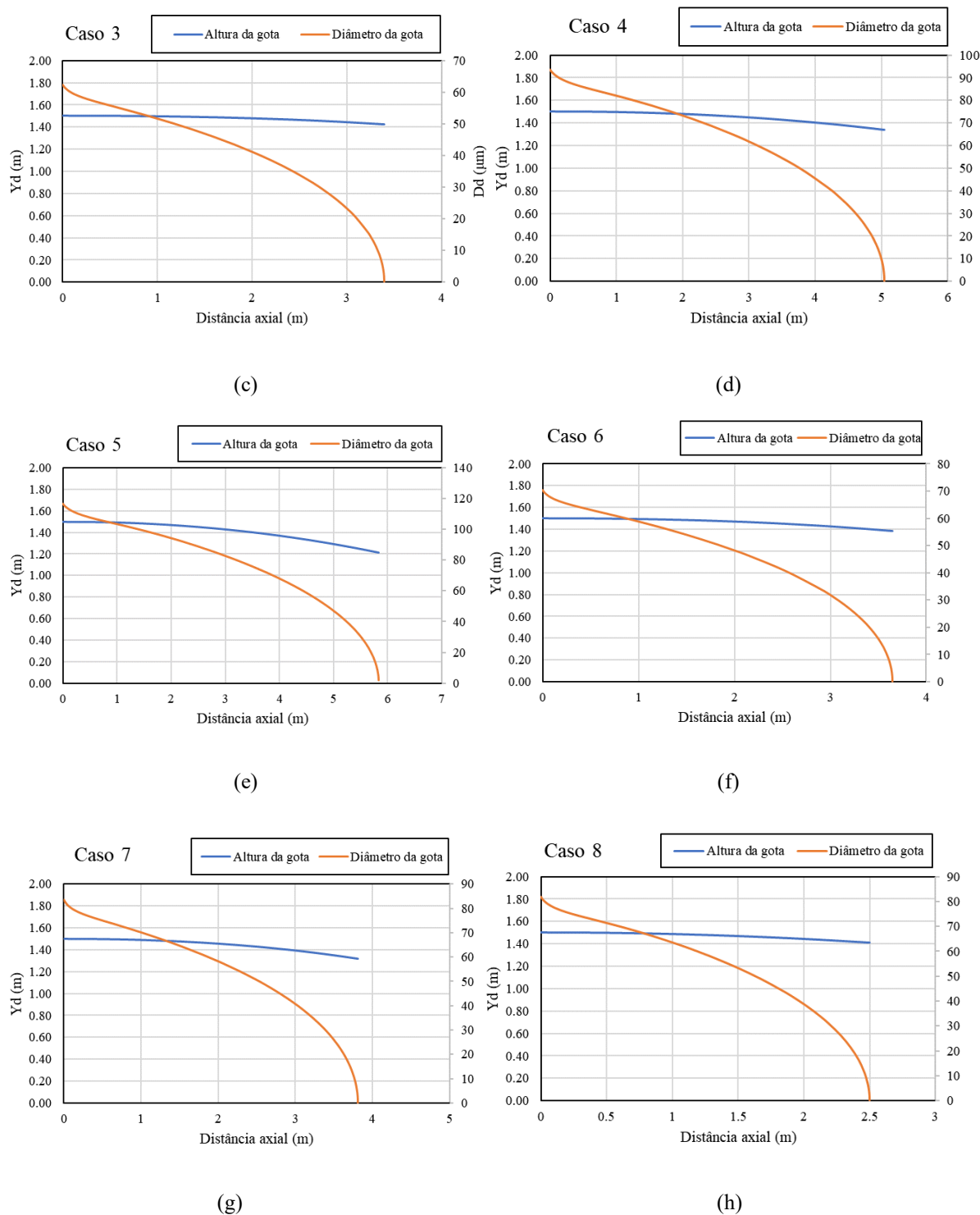
Verificou-se também o efeito do grau de sub-resfriamento na distância necessária para as gotículas evaporarem. Quando o grau de sub-resfriamento aumenta, a distância necessária para evaporação completa das gotas aumenta. Para o mais alto grau de sub-resfriamento testado, o modelo de Ichard *et al.* (2006) subestima a distância de evaporação enquanto o modelo proposto prevê com acuracidade. A Figura 5.14 apresenta os gráficos referentes aos perfis de diâmetro e altura das gotas afim de avaliar a ocorrência de chuva (*rainout*). Nota-se que a chuva não ocorre em nenhum dos casos para os diâmetros médios considerados.

Figura 5.14 - Diâmetro e altura da gota para prever rainout: (a) Caso 1; (b) Caso 2; (c) Caso 3; (d) Caso 4; (e) Caso 5; (f) Caso 6; (g) Caso 7; (h) Caso 8.



(a)

(b)

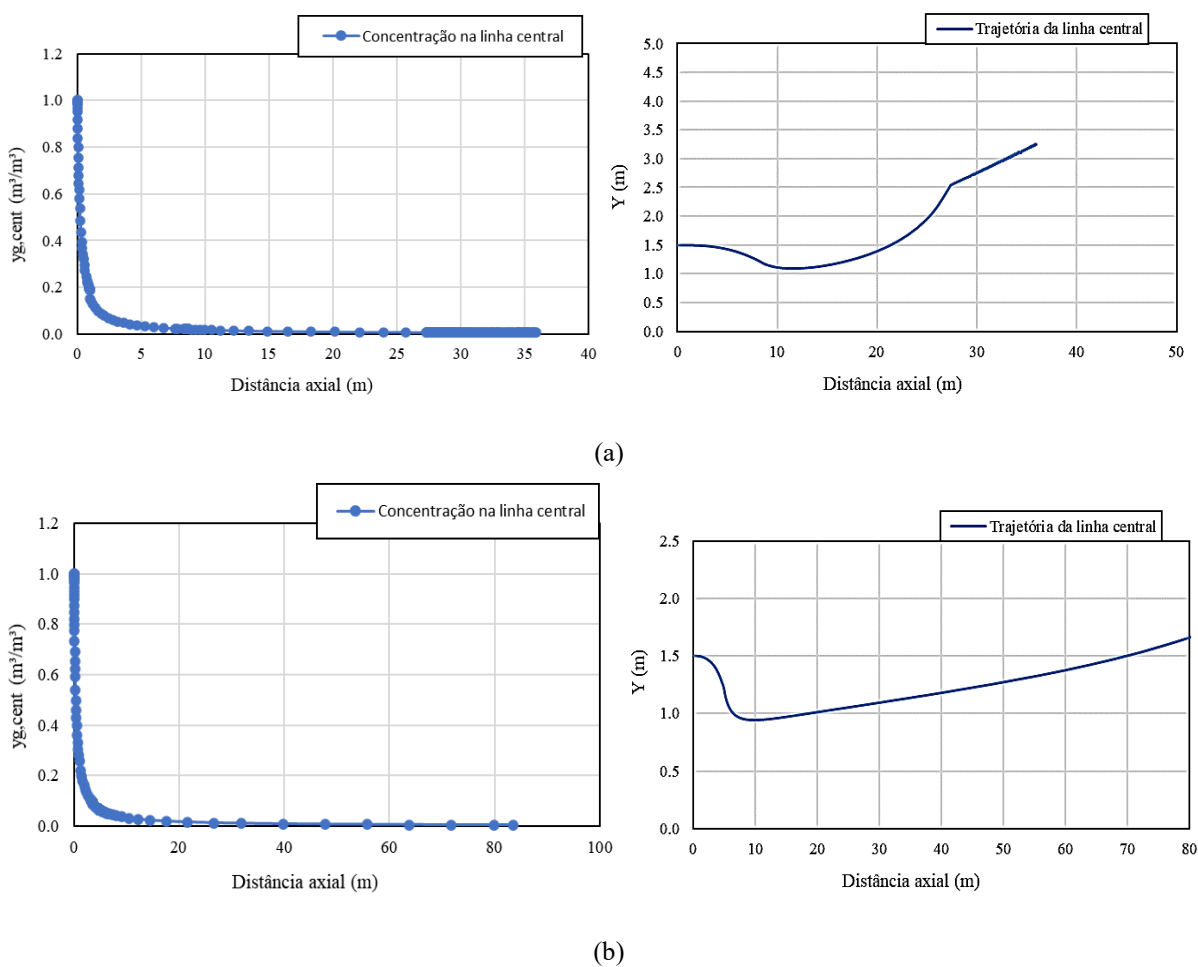


Finalmente, avalia-se o perfil de concentração e a trajetória na linha central (Figura 5.15) para estimativa da extensão da área classificada. A Figura 5.15 mostra os resultados para os casos 1 e 2, os demais perfis são semelhantes e podem ser consultados no Apêndice C assim como os resultados para a gota, variáveis médias e na linha central do jato. Os dados extraídos dos gráficos são mostrados na Tabela 5.11 bem como a extensão obtida conforme a Equação 4.129. A concentração mínima considerada para o butano é de 1.8%.

Tabela 5.11 - Extensão da área classificada.

Caso	Distância axial (m)	Altura (m)	Extensão (m)
1	8.70	1.3	8.70
2	21.89	1.02	21.89
3	20.78	0.99	20.78
4	22.57	0.89	22.57
5	22.68	0.85	22.68
6	21.42	0.99	21.42
7	19.05	0.99	19.06
8	10.38	1.14	10.38

Figura 5.15 - Concentração e trajetória na linha central: (a) Caso 1; (b) Caso 2.

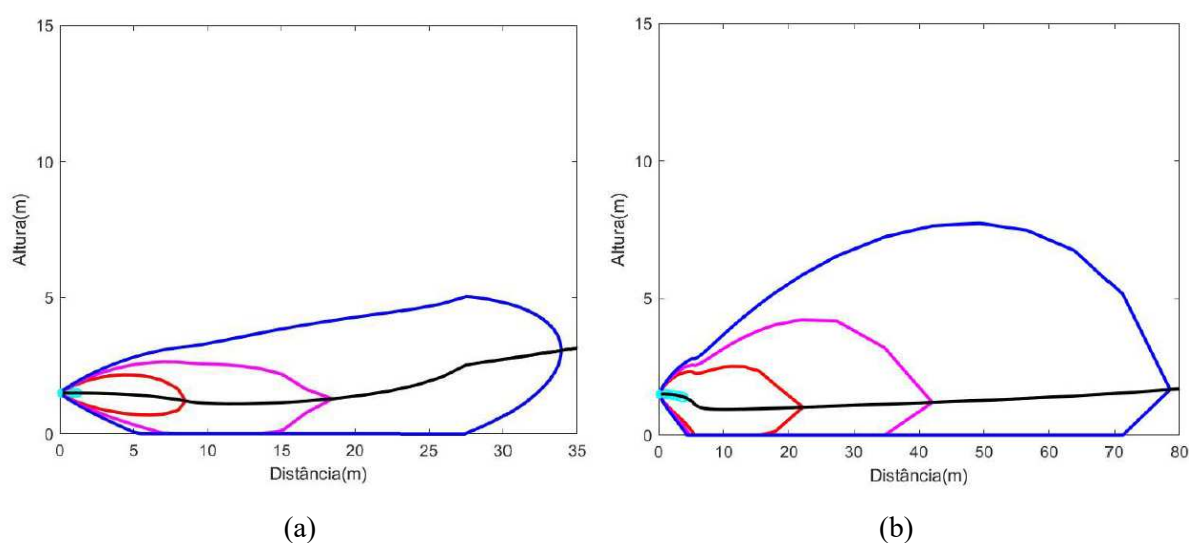


As extensões obtidas coincidem com a extensão axial devido ao fato de que a altura de liberação é pequena. Acredita-se que para alturas maiores a extensão da área classificada será significativamente maior que a extensão axial.

Com relação aos casos de propano, a extensão estimada em Allen é consideravelmente inferior a obtida no teste FLIE pois a vazão de liberação também é menor e nenhum vento é considerado. Nos casos relacionados ao butano observou-se grandes extensões que, como mencionado, são resultantes da quantidade de componente liberado e da influência de vento, uma vez que os experimentos ocorreram em ambiente aberto. Nenhum dado para comparação foi encontrado. Nota-se que a nuvem de gás tocou o solo em vários testes para o butano.

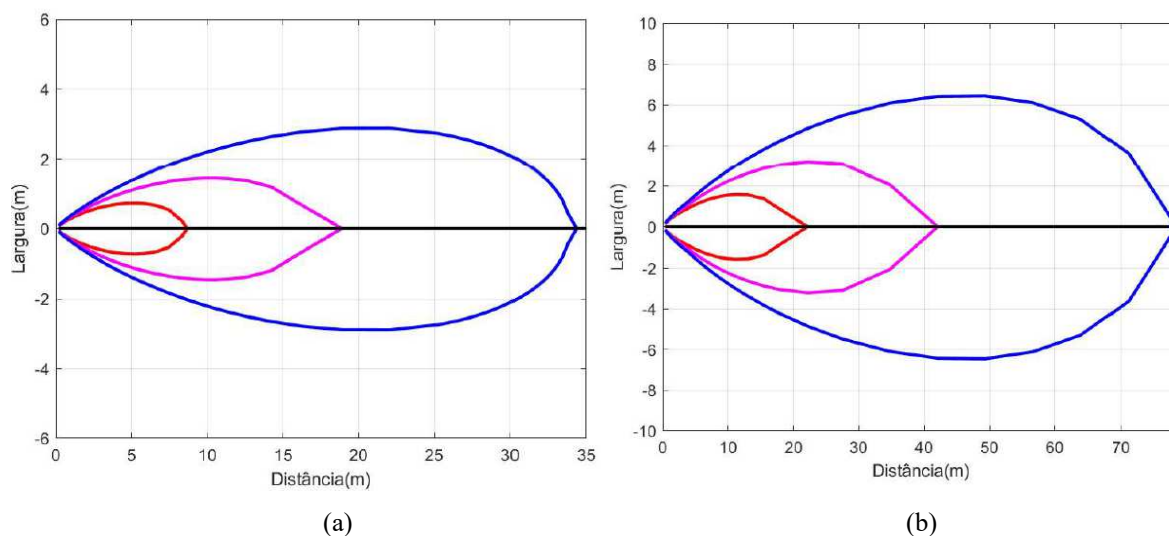
As isolinhas para pluma vertical e horizontal obtidas para os casos 1 e 2 são mostradas na Figura 5.16 e 5.17, os demais contornos para o butano são similares e encontram-se no Apêndice C. Os volumes inflamáveis são exibidos na Tabela 5.12.

Figura 5.16 - Isolinhas verticais: (a) caso 1; (b) caso 2.



Para o caso 1 a pluma não toca o solo apenas no LII, já no caso 2 o solo é atingido em todas as concentrações especificadas. O mesmo é observado nos demais casos. As isolinhas para o butano, ao tocar o chão, tendem a aumentar o raio crítico resultando em um contorno maior como em $\frac{1}{4}$ LII. Uma vez que a seção transversal ao tocar o solo é retangular, presume-se que a pluma deveria assumir aproximadamente o mesmo formato. Uma vez que as isolinhas são geradas com base no raio crítico, pressupõe-se que seja necessário realizar um ajuste ou modificação na correlação para situação de dispersão ao nível do solo.

Figura 5.17 - Isolinhas laterais: (a) caso1; (b) caso2



A previsão das isolinhas deve ser bem definida pois essas figuras ajudam os tomadores de decisão a evitar colocar objetos que possam causar faíscas na área ocupada pelo volume inflamável, uma vez que qualquer faísca inicia um jato de fogo. Dessa forma, é necessário identificar possíveis situações de vento lateral que possam mudar a trajetória do jato.

Tabela 5.12 - Volumes Inflamáveis.

Caso	Volume Inflamável (m³)		
	LII	½ LII	¼ LII
Allen	0.658321	5.357093	40.88724
1	12.84429	101.6768	753.3429
2	213.8696	1437.401	7541.925
3	285.3064	2016.733	12082.44
4	344.3589	2642.081	17071.25
5	313.3085	2408.79	16677.93
6	303.7667	1977.936	11149.66
7	211.7324	1314.525	7514.65
8	27.32137	174.282	1129.655

5.5 Aplicabilidade do Modelo

Para avaliar a aplicabilidade do modelo foram realizadas simulações utilizando outras substâncias inflamáveis (pentano, hexano, heptano e octano). Além disso, também testou-se diferentes ângulos de inclinação para a liberação.

5.5.1 Simulações para Teste

Nenhum dado experimental foi encontrado para validação nessas situações. Sendo assim, os casos simulados foram estabelecidos utilizando como critério a consideração de uma fração de vapor diferente de zero no orifício, ou seja, de maneira a se ter uma liberação bifásica. As condições não necessariamente representam um processo real.

Todos os casos foram tratados como líquido saturado com pressão de armazenamento de 1.2 bar, um diâmetro de orifício de 2 mm, altura de liberação de 1 m e condições ambiente de 25°C e 1 atm. Os principais resultados são exibidos na Tabela 5.13 e discutidos nas subseções seguintes. A correlação considerada para o cálculo do diâmetro médio da gota é a fornecida pelo CCPS.

5.5.1.1 Temperatura na Linha Central

O modelo consegue simular casos com diferentes componentes. Salienta-se que a aplicabilidade é para casos em que o fluxo pós expansão é bifásico podendo a liberação ser bifásica ou líquida.

A partir dos resultados apresentados na Figura 5.18 para a temperatura, observa-se que à medida que o componente de vazamento se torna mais pesado maior será a temperatura mínima atingida. Isso ocorre, pois, a temperatura inicial (temperatura de bolha) também aumenta. Para os casos de heptano e octano praticamente já não se consegue distinguir, apenas observando o gráfico, os pontos inicial e final das regiões bifásica e monofásica, respectivamente.

5.5.1.2 Avaliação da Ocorrência de Chuva

A Figura 5.19 apresenta o resultado para trajetória e tamanho da gota. Verifica-se que a chuva ocorre para todos os componentes em aproximadamente 90 cm, resultado diferente do obtido para as substâncias mais leves abordadas anteriormente (propano e butano).

Tabela 5.13 – Principais resultados.

Comp.	Orifício					Pós Expansão				<i>Rainout</i>	
	P_e (bar)	T_e (°C)	$\phi_{v,e}$	u_e (m.s ⁻¹)	q_e (kg.s ⁻¹)	$\phi_{v,f}$	u_f (m.s ⁻¹)	d_f (cm)	x_o (cm)	SMD(μm)	Distância para chuva (m)
Pentano	1.11	38.80	0.0155	10.79	0.0051	0.0348	16.84	0.23	4.52	1189	0.90
Hexano	1.12	71.93	0.0176	10.57	0.0049	0.0424	17.35	0.23	4.34	1058	0.91
Heptano	1.12	101.90	0.019	10.42	0.0047	0.0486	17.67	0.24	4.23	966	0.92
Octano	1.12	129.5	0.0212	10.33	0.0045	0.0552	18.06	0.24	4.12	872	0.92

Figura 5.18 - Temperatura na linha central para: (a) pentano; (b) hexano; (d) heptano; (d) octano.

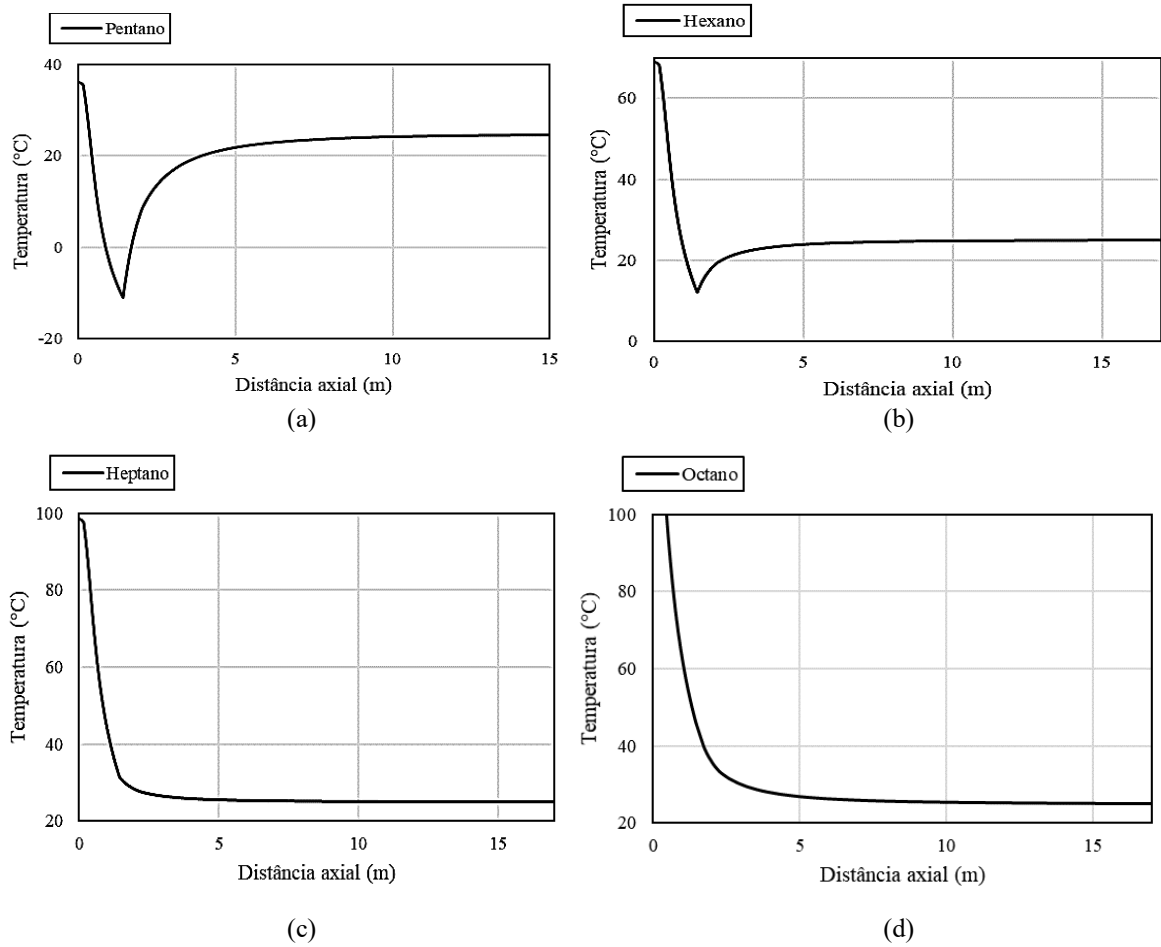
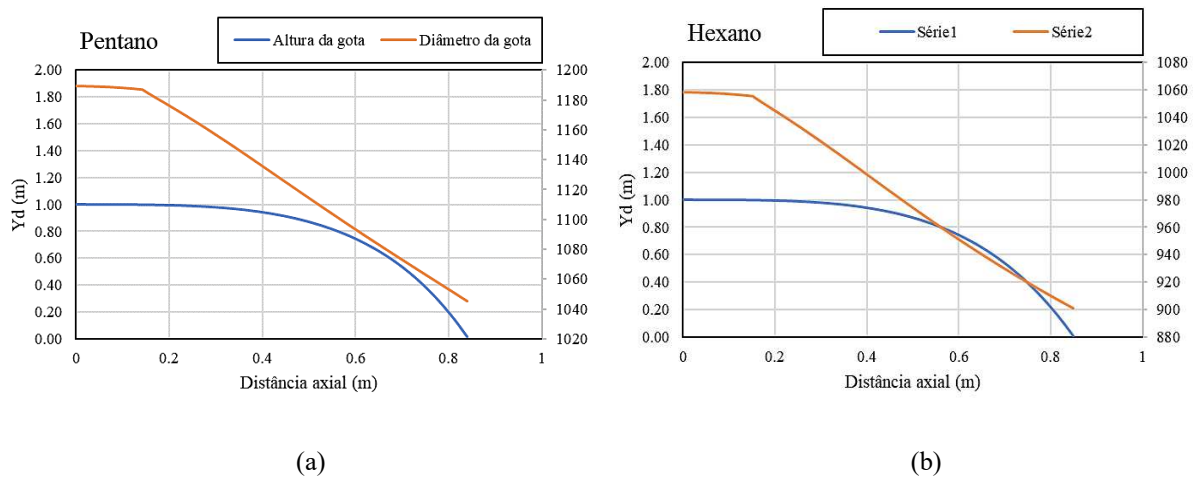
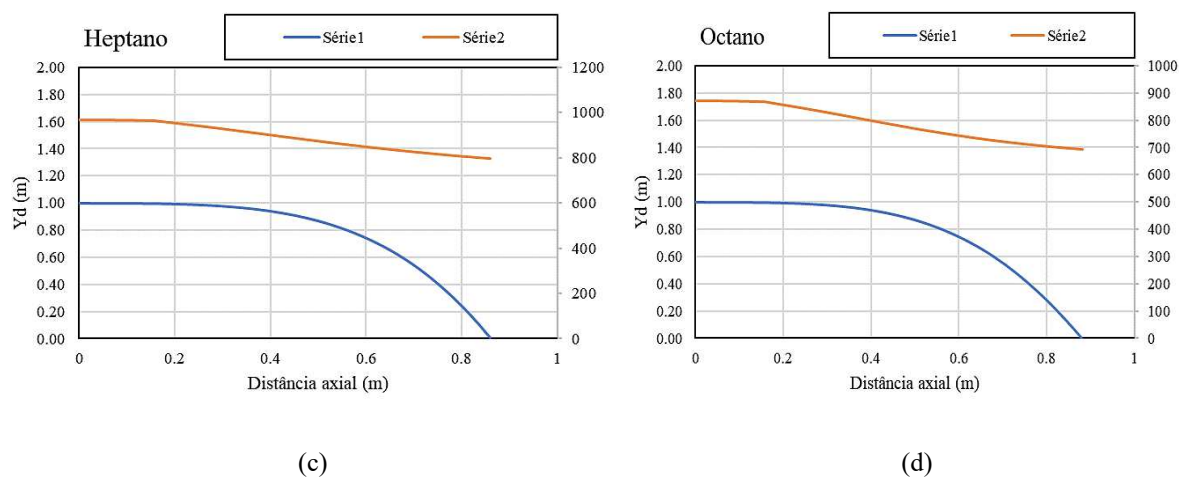


Figura 5.19 - Avaliação da trajetória e tamanho da gota para previsão de rainout: (a) pentano; (b) hexano; (c) heptano; (d) octano.

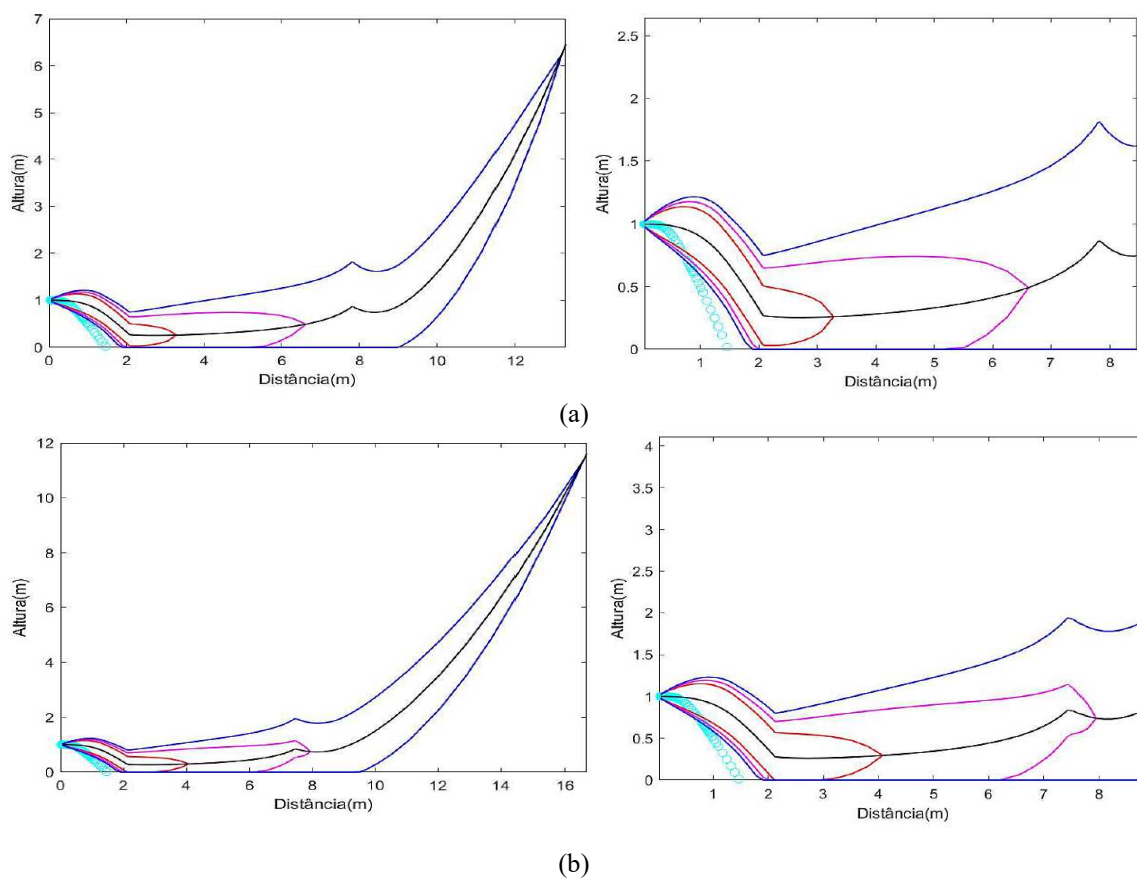




5.5.1.3 Isolinhas

O comportamento das isolinhas bem como a extensão da área classificada no LII é semelhante para todos os componentes. Assim como nos casos anteriores, é possível observar uma descontinuidade em alguns pontos. Isso ocorre devido a mudança de modelo quando o contorno do jato atinge o solo ou volta a se elevar.

Figura 5.20 - Isolinhas verticais: (a) pentano; (b) hexano; (c) heptano; (d) octano.



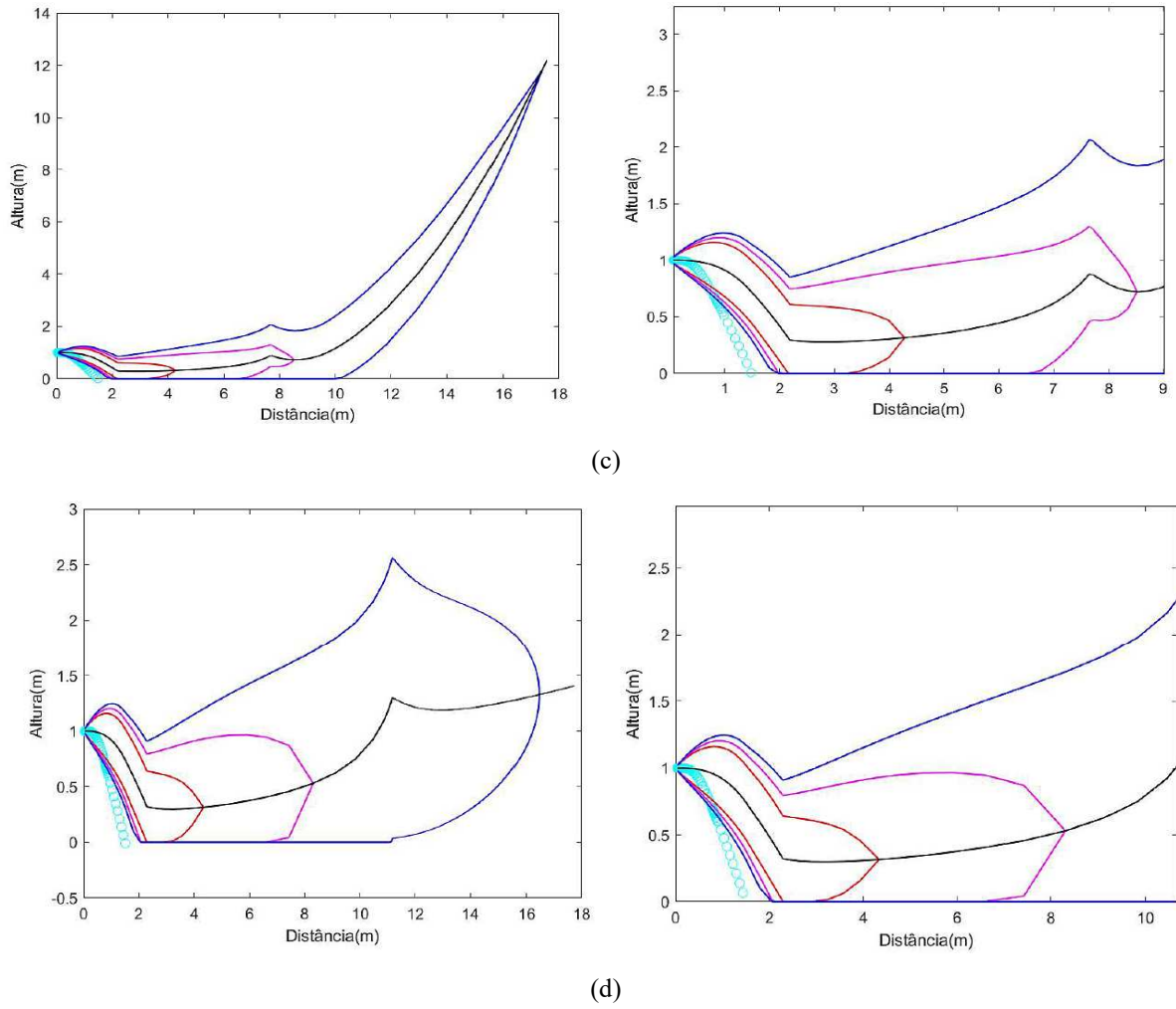
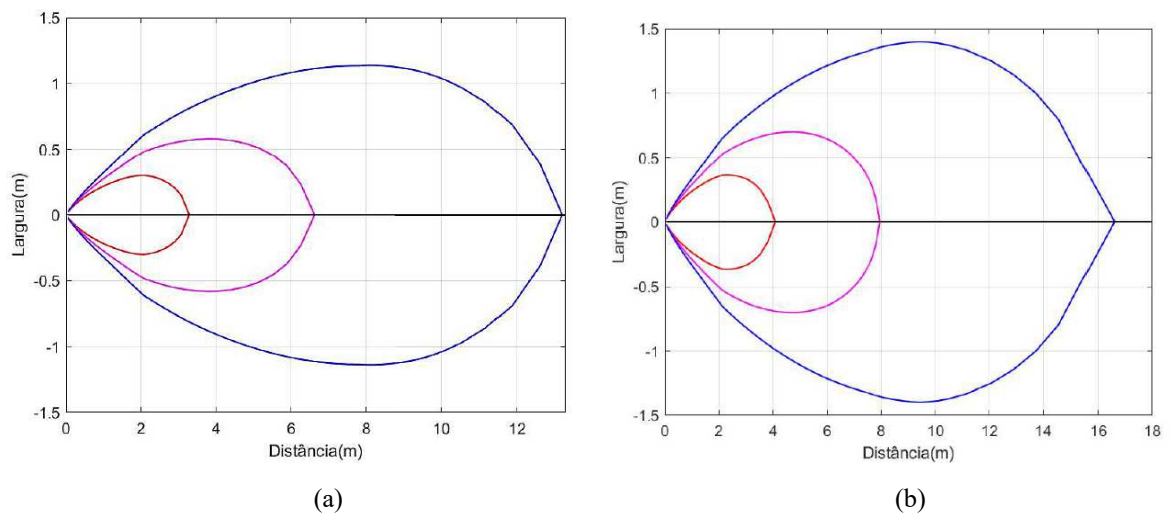
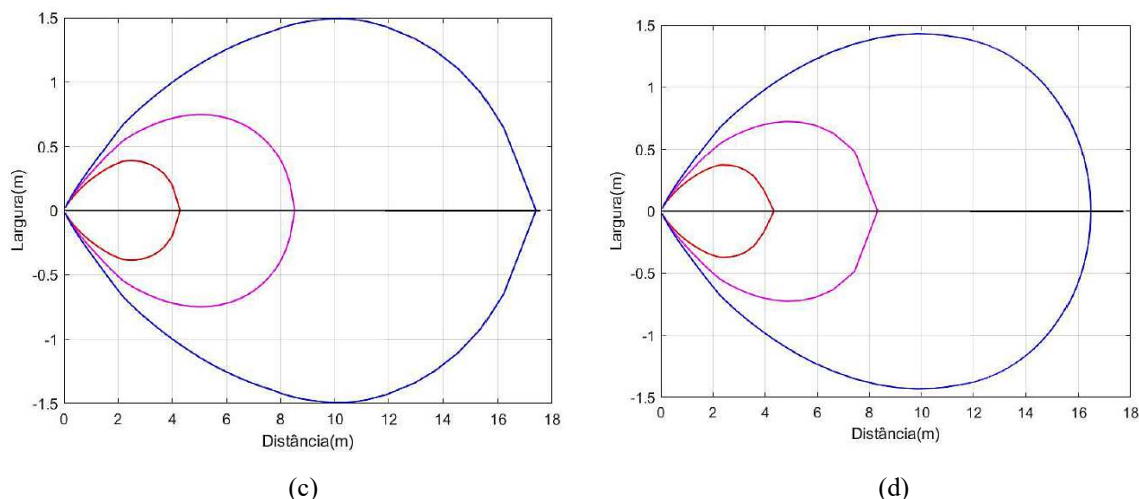


Figura 5.21 - Isolinhas laterais: (a) pentano; (b) hexano; (c) heptano; (d) octano.





5.5.2 Variação do Ângulo de Liberação

Foram testados ângulos com inclinação positiva (30° , 45° , 60° e 85°) e com inclinação negativa (-30° , -45° , -60° e -85°) afim de verificar o comportamento do modelo e a influência dessa variável nos resultados. Utilizou-se apenas o caso 1 do projeto FLIE para avaliação pois o comportamento discutido abaixo é similar para os demais casos.

Com base em testes realizados, observou-se que o modelo somente é aplicável a situações de liberação vertical se um vento mínimo e a favor do vazamento for considerado. Até o momento da elaboração deste material, não foi possível concluir qual o valor limite para essa variável que pudesse abranger qualquer situação.

5.5.2.1 Inclinação Positiva

As Figuras 5.22 e 5.23 mostram as isolinhas verticais (vista lateral) e laterais (vista superior) para as diferentes inclinações consideradas nesse trabalho. Observa-se que a gota (cor azul claro) segue a trajetória da linha central e é impulsionada para cima. Nesse sentido, quanto maior a inclinação, menor será a extensão da região bifásica. Nota-se ainda que os contornos não tocam o solo, diferente do que ocorre quando a liberação é horizontal (veja a Figura 5.16(a)). Essa situação pode ser diferente para componentes mais pesados nos quais os contornos podem tocar o solo mesmo em algumas inclinações positivas.

Em relação as isolinhas laterais verifica-se que quanto maior for a inclinação maior será a abertura lateral. Assim, para uma inclinação de 85° observamos uma maior abertura para todas

as concentrações consideradas. Essa situação pode ser verificada no uso de mangueira domésticas quando o fluxo de água é direcionado para cima.

Figura 5.22 - Isolinhas verticais para o caso 1: (a) 30°; (b) 45°; (c) 60°; (d) 85°.

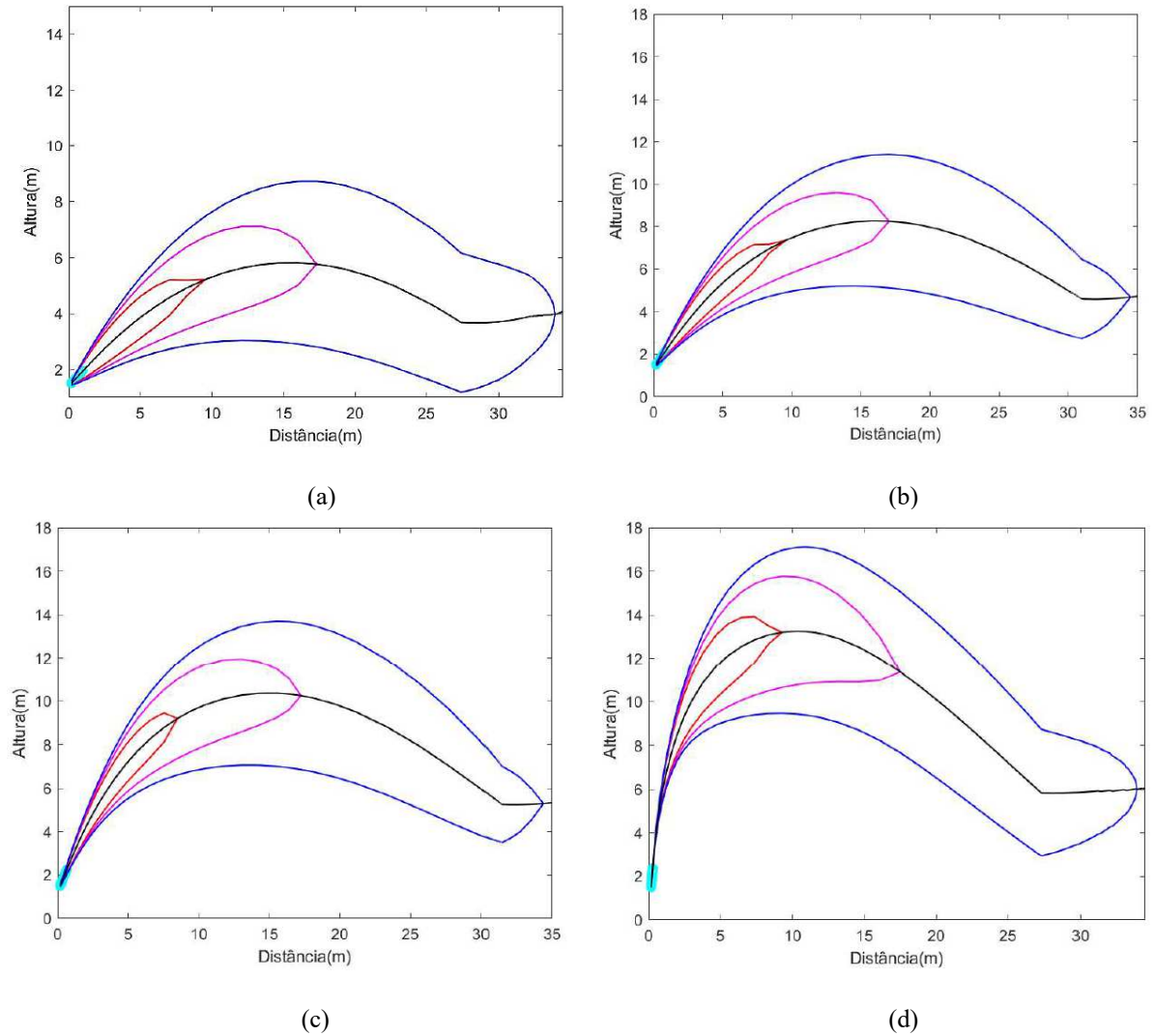
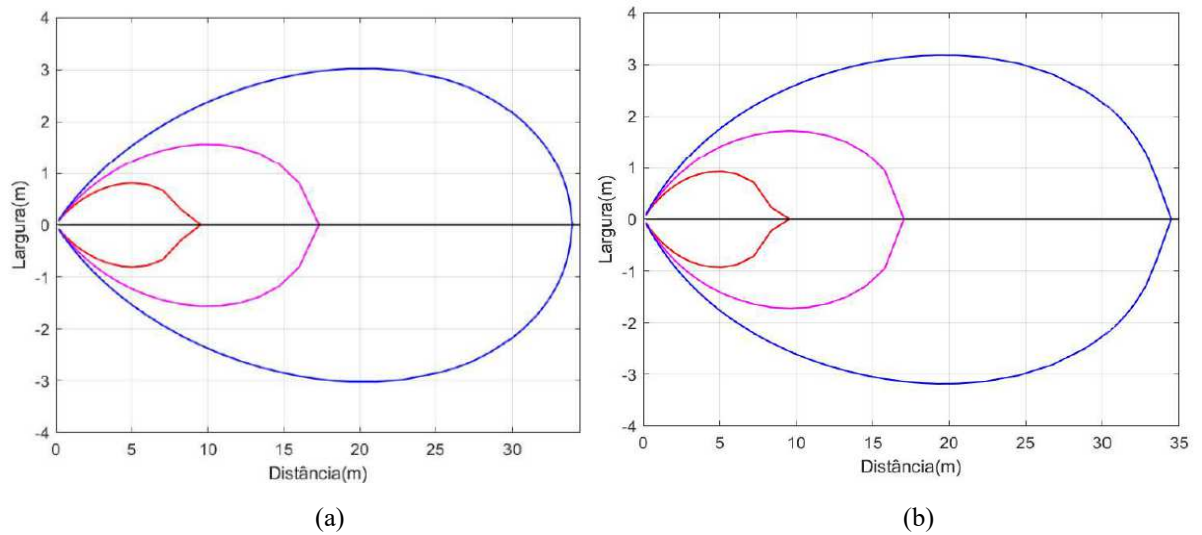
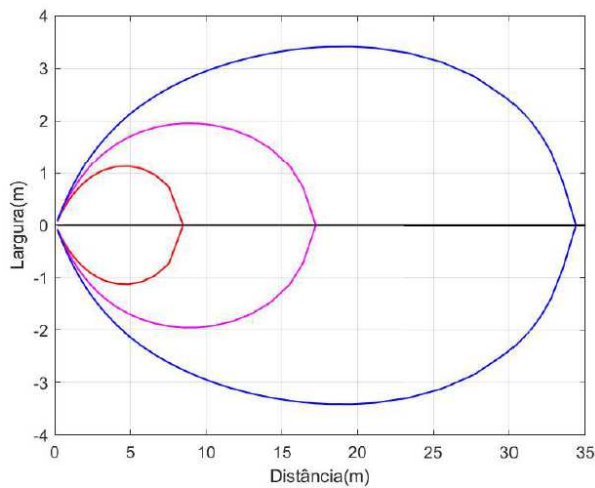
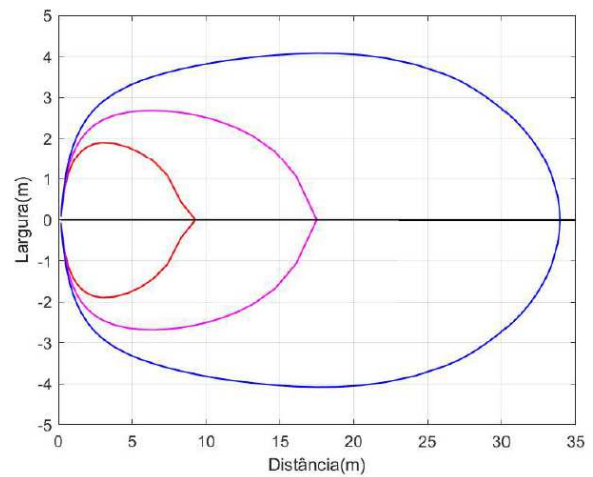


Figura 5.23 - Isolinhas laterais para o caso 1: (a) 30°; (b) 45°; (c) 60°; (d) 85°.





(c)



(d)

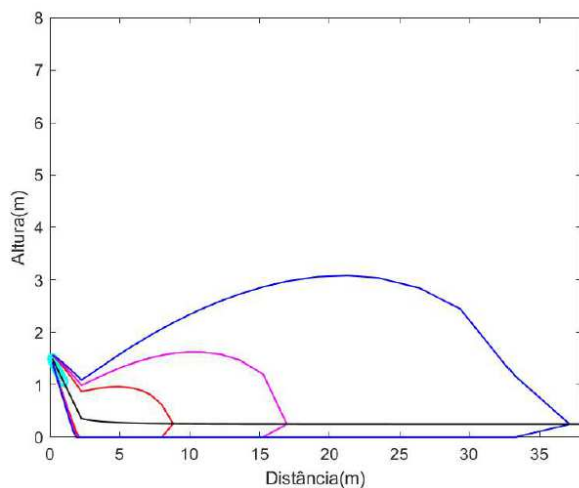
5.5.2.2 Inclinação Negativa

Quando a inclinação é negativa, o jato tende a tocar o solo mais rapidamente. Em outras palavras, quanto mais inclinada para baixo for a liberação, menor será a distância que o jato irá percorrer até tocar o solo. Isso pode ser observado na Figura 5.24.

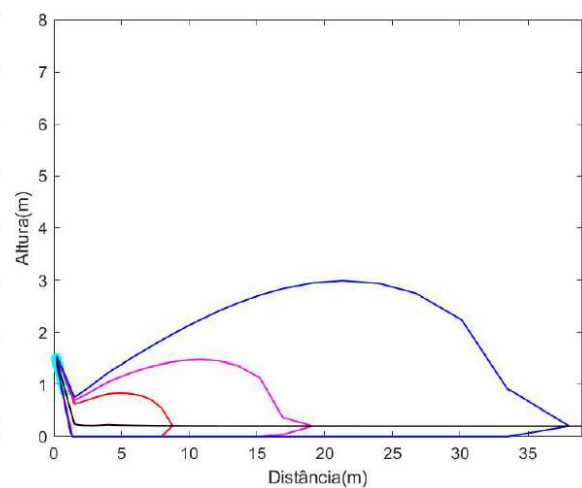
É possível notar ainda que até tocar o solo, quando o jato ainda é elevado, a abertura tende a diminuir. Durante a dispersão ao nível do solo, a pluma tende a apresentar um contorno mais suave (Figura 5.24 (d)).

Ao contrário do que ocorre para inclinação positiva, a abertura lateral do jato tende a diminuir com o aumento da inclinação negativa, como pode ser observado na Figura 5.25. Ou seja, o jato tende a se tornar mais achatado.

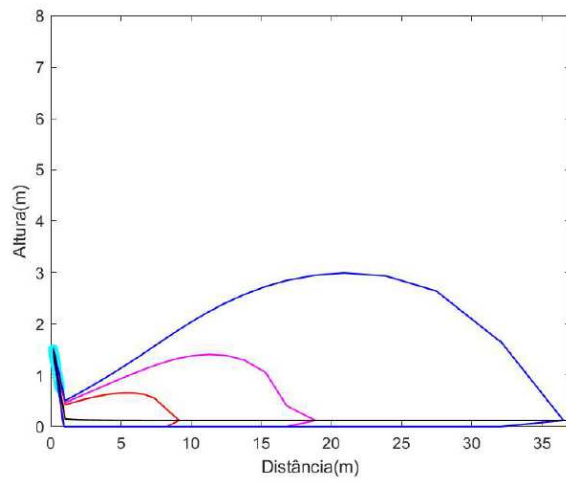
Figura 5.24 - Isolinhas verticais para o caso 1: (a) -30°; (b) -45°; (c) -60°; (d) -85°.



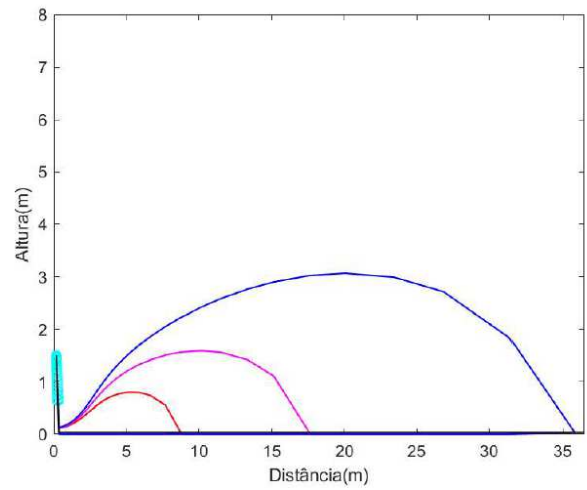
(a)



(b)

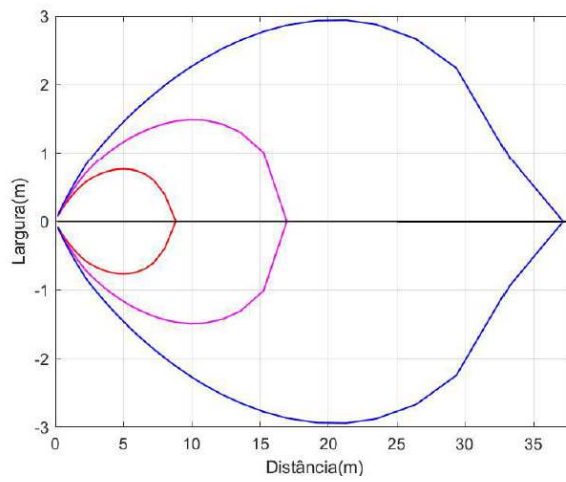


(c)

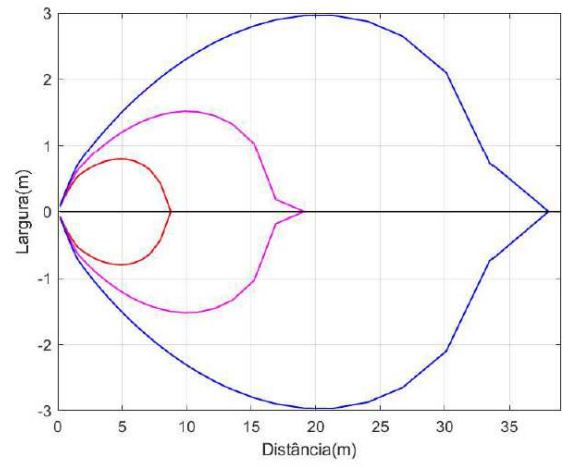


(d)

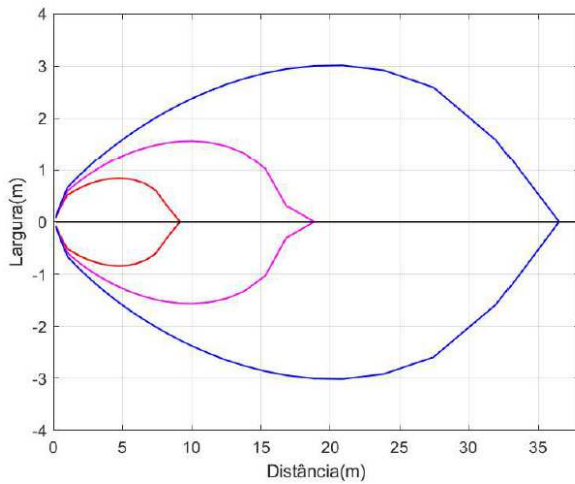
Figura 5.25 - Isolinhas laterais para o caso 1: (a) -30°; (b) - 45°; (c) - 60°; (d) - 85°.



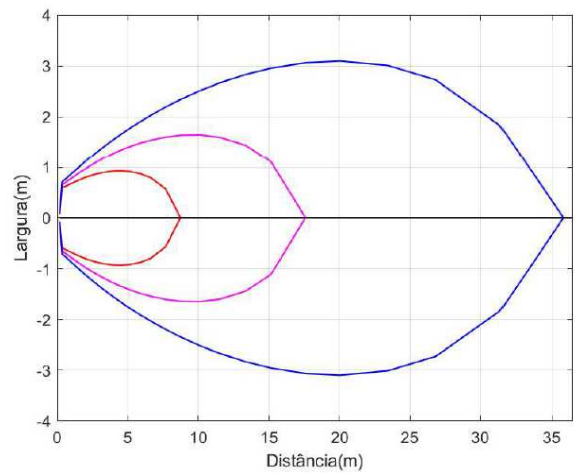
(a)



(b)



(c)



(d)

Capítulo 6

Conclusão

6.1 Considerações Finais

Os cenários de liberações bifásicas envolvem diversos fenômenos importantes que devem ser considerados para sua melhor compreensão e inferir maior confiabilidade em estudos para previsão da área classificada. É comum observarmos a elaboração de classificação de áreas de risco sem quaisquer participações de Engenheiros Químicos, que são os profissionais normalmente incumbidos de determinar as condições de projeto e operação em plantas químicas e petroquímicas e que dispõem de treinamento específico nos fenômenos de transporte, o que pode acarretar no desenvolvimento de modelos com várias limitações. Além disso, várias organizações restringem-se ao uso e incertezas das prescrições normativas.

Foram utilizados como base para esse trabalho os diversos modelos disponíveis na literatura, porém, tais modelos geralmente são tratados separadamente. Desse modo, desenvolveu-se uma correlação entre eles com aplicação de melhorias e ajustes, visto que, os sistemas de liberações bifásicas possuem uma considerável complexidade e a maioria das correlações existentes na literatura são empíricas e aplicadas a jatos de gás.

Nesse sentido, para a região bifásica, desenvolveu-se uma razão de normalização para cálculo da temperatura na linha central. Ajustou-se as constantes de decaimento empregadas na obtenção da velocidade, concentração e temperatura na linha central, para se evitar discontinuidades no modelo. Os efeitos da fase vapor do componente foram contabilizados no balanço de energia, o que não ocorre na maior parte dos estudos disponíveis na literatura uma vez que tratam o processo com gotas se dispersando livremente (apenas em ar ambiente). Desenvolveu-se uma correlação para determinação do coeficiente de arraste para aplicação em casos com alto grau de sub-resfriamento.

Os perfis de temperatura obtidos por esse trabalho possuíram melhor concordância aos pontos experimentais em comparação aos resultados obtidos por Coldrick (2016) e Ichard *et al.* (2009). Para os demais resultados não foram encontrados dados experimentais para comparação em virtude do número limitado de ensaios bem documentados para validação de modelos. No entanto, todos apresentaram o comportamento esperado para cada variável do processo.

Verificou-se que o método desenvolvido pode ser utilizado em situações considerando substâncias inflamáveis mais pesadas e diferentes ângulos de inclinação na liberação. Com isso, foi possível observar que essa última variável pode influenciar na abertura lateral do jato bem como na existência da dispersão ao nível do solo.

6.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Nesse trabalho foi possível avaliar os casos nos quais a chuva e possível formação de poça poderia ocorrer. A partir dessa avaliação, recomenda-se realizar a modelagem de poça afim de verificar a influência dessa fonte na dimensão da área classificada.

Dado que a correlação utilizada para obtenção do raio crítico é voltada para jatos elevados, no qual a seção transversal é circular, aconselha-se verificar a necessidade de ajustes ou modificações para o momento em que o jato se dispersa no solo.

Finalmente, sugere-se a adaptação do modelo para casos multicomponentes.

REFERÊNCIAS

- ABNT NBR IEC 60079-10-1 - **Atmosferas Explosivas - Parte 10-1: Classificação de Áreas - Atmosferas Explosivas de Gás**. 2009.
- ABNT NBR IEC 60079-10-1 - **Atmosferas Explosivas - Parte 10-1: Classificação de Áreas - Atmosferas Explosivas de Gás**. 2015.
- ABNT NBR IEC 60079-10-2 - **Atmosferas Explosivas - Parte 10-2: Classificação de Áreas - Atmosferas de Poeiras Combustíveis**. 2015.
- ABNT NBR IEC 60050-426 - **Vocabulário Eletrotécnico Internacional - Parte 426: Equipamentos para Atmosferas Explosivas**. 2011.
- ABRAMZON, B.; SIRIGNANO, W. A. **Droplet vaporization model for spray combustion calculations**. International Journal of Heat and Mass Transfer, 32(9):1605 – 1618, 1989.
- ALLEN, J. T. **Laser Based Measurements in Two-phase Flashing Propane Jets**. Tese de Doutorado. 1995.
- AMERICAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS – AICHE. **Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis**. New York. Wiley-Interscience: 2 ed., 2000.
- ANJOS, D. A. **Determinação da Extensão de Áreas Classificadas para Liberações Bifásicas**. Universidade Federal de Campina Grande. Dissertação de mestrado. Campina Grande, PB, p. 112, 2017.
- ANTOINE, Y.; LEMOINE, F.; LÉBOUCHE, M. **Turbulent transport of a passive scalar in a round jet discharging into a coflowing stream**. Euro. J. Mech. B/Fluids 20, 275-301, 2001.
- American Petroleum Institute, API RP 505 - **Recommended Practice for Classification of Locations for Electrical Installations at Petroleum Facilities Classified as Class I, Zone 0, Zone 1 and Zone 2**.
- American Petroleum Institute , API STANDARD 520 - **Sizing, Selection, and Installation of Pressure-relieving Devices. Part I—Sizing and Selection**. 9ª edição, dezembro, 2013.
- APPLETON, P. R. **A study of axi-symmetric two-phase flashing jets**. Technical Report SRD-R-303, U.K.A.E.A., Culcheth, Warrington, Cheshire, United Kingdom, 1984.
- ARAÚJO, Silas A. C. J. F. **Introdução ao Sistemas de Controle**. Universidade do Estado de Santa Catarina. 2020.
- ARNULFO, G.; BERTANI, C.; DE SALVE, M. **Prediction of two-phase choked-flow through safety valves**. 1ª UIT (Italian Union of Thermo-fluid-dynamics) Heat Transfer Conference. Journal of Physics: Conference Series 501, 2014.
- BABU, P.C.; MAHESH, K. **Upstream entrainment in numerical simulations of spatially evolving round jets**. Phys. Fluids 16(10), 3699-3705, 2004.
- BAHADORI, Alireza. **Hazardous Area Classification in Petroleum and Chemical Plants: A Guide to Mitigating Risk**. New York. CRC Press, 2013.

- BARROS, P.L. **Engineering Applications of Typical Non-Reacting Flows Using Computational Fluid Dynamics**. Universidade Federal de Campina Grande. Dissertação de mestrado. Campina Grande-PB, p. 11. 2020.
- BARROS, P.L.; LUIZ, A.M.; NASCIMENTO, C.A.; NETO, A.T.P.; ALVES, J.J.N. **On the non-monotonic wind influence on flammable gas cloud from CFD simulations for hazardous area classification**. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 2020. <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2020.104278>.
- BARROS,P.L.;OLIVEIRA, T.C.L.; ALVES, J.J.N. **Liberação Bifásica de Butano em Ambiente Aberto para Classificação de Área de Risco Através de CFD**. XII Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica. São Carlos – SP, 2017.
- BENINTENDI, Renato. **Process Safety Calculations**. 2021.
- BOSCH, C.J.H. van den; WETERINGS, R.A.P.M.; DUIJM, N.J.; BAKKU, E.A.; MERCX, W.P.M.; BERG, A.C. van den; ENGELHARD, W.F.J.M.; DOORMAN, J.C.A.M. van; WEES, R.M.M. **Methods for the calculation of physical effects: due to releases of hazardous materials (liquids and gases)**. Yellow Book. 3.ed., 2005;
- BOSSERT, John A. **Hazardous Locations - A Guide for the Design, Construction and Installation of Equipamente in Explosive Atmospheres**. 3.ed. Toronto:Canadian Standards Association, 2001.
- BOTTRILL, Geoffrey; CHEYNE, Derek; VIJAYARAGHAVAN, G. **Practical Electrical Equipment and Installations in Hazardous Areas**. 1^a. ed. 2005.
- BRAMBILLA, S.; MANCA, D. **Accidents involving liquids: A step ahead in modelling pool spreading, evaporation and burning**. *J. Hazard. Mater.*, 161 (2-3), 1265- 1280. 2009.
- BRICARD, P.; L. FRIEDEL. **Two-phase jet dispersion**. *Journal of Hazardous Materials* 59: 287-310. 1998.
- BULGARELLI, Roberval. **O Setor Elétrico. Instalações Elétricas e de Instrumentação para Áreas Classificadas**. Capítulo VII, jul. 2009.
- BULGARELLI, Roberval. **O ciclo total de vida das instalações em atmosferas explosivas**. 1^a. ed.
- CALAY, R.K.; HOLDO, A.E. **Modelling the dispersion of flashing jets using CFD**. *Journal of Hazardous Materials* . Volume 154, Issues 1–3, Pages 1198–1209, 2007.
- CAVANAUGH II, T.A.;SIEGELL, J.H.;STEINBERG, K.W. **Simulation of vapor emissions from liquid spills**. *Journal of Hazardous Materials*, 38, 41-63, 1994.
- CHAIA, Aline Villela; DAIBERT, Maria Ribeiro. **Mini Curso Introdução ao MATLAB. GET - Engenharia de Produção - UFJF**, 2013.
- CHEN, T.; WAGNER, J.L; FARIAS, P.A. **Study of Galinstan Liquid Metal Breakup Using Backlit Imaging and Digital In-line Holography**. International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Chicago, Illinois, 2018.
- CHEN, T.; DEMAURO, E.P.; WAGNER, J.L.; ARIENTI, M. **Aerodynamic Breakup and Secondary Drop Formation for a Liquid Metal Column in a Shock-Induced**. American Institute of Aeronautics and Astronautics. 2016.

- CLIFT, R.; GRACE, J.R.; WEBER, M.E. **Bubbles, Drops and Particles**. Academic Press, New York, 1978.
- CLIFT, R.; GRACE, J.; WEBER, M. **Bubbles, drops, and particles**. Dover books on engineering. Dover Publications, 2005.
- COLDRICK, S., **Modelling Small-scale Flashing Propane Jets**. Chemical Engineering Transactions, v. 48, p.73-78, 2016.
- CORREA, Karen S.; FERREIRA, Tatiele D.; VIANNA, Sávio. **The Nature of Flammable Cloud Volumes in Semi-confined Environment under the Influence of Flow of Air**. 22nd Annual International Symposium. 2019
- CROWL, D. A.; LOUVAR, J. F. **Chemical Process Safety - Fundamentals with Applications**. Terceira Edição. 2011.
- CRUZ, S.R.A. **Análise Comparativa das Metodologias Utilizadas para Classificação de Áreas Potencialmente Explosivas em Unidades de Refino de Petróleo**. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química. Dissertação de mestrado. Rio de Janeiro, p. 136. 2012.
- DRIVAS, Peter J. **Calculation of Evaporative Emissions from Multicomponent Liquid Spills**. Environmental Research & Technology, Inc., Concord, Massachusetts. 726-728, 1982.
- DUNBAR, I.H.; HIORNS, D. N.; MATHER, D. J.; TICKLE, G. A. **Atomisation and Dispersion Of Toxic Liquids Resulting From Accidental Pressurised Releases**. I Chem E Symposium Series No. 134, Pages 143 – 154, 1994.
- ESPSTEIN, M.; FAUSKE, H.K.; HAUSER, G.M. **A model of the Dilution of a Forced Two-Phase Chemical Plume in a Horizontal Wind**. J. Loss Prev. Process Ind., vol 3, julho, 1989.
- ERTHAL, Leandro; LIMA, Gilson Brito Alves; JORDÃO, Dácio Miranda. **Classificação de Áreas Quanto ao Aspecto de Atmosferas Potencialmente Explosivas: Um Estudo de Caso na Gestão Multidisciplinar para a Indústria do Petróleo. 2004**. Disponível em: <<https://www.inovarse.org/filebrowser/download/9128>>. Acesso em: 12 junho 2021.
- EZZAT, K. H.; MANSOUR, M.S.; IBRAHIM, I.I.; SHOUKRY, F.A. **Applying a Hazard Area Classification Study on an (Liquefied Petroleum Gas/Synthetic Natural Gas) System in a Steel Factory to Highlight Major Hazards**. Chemical Sciences Journal, 2018.
- FAUSKE, H.K.; EPSTEIN, M. **Source term considerations in connection with vapour cloud modelling**. *Loss Prev Proc Ind.* 1988;
- FERNANDEZ, María Isabel; HARPER, Mike; MAHGEREFTEH, Haroun; Witlox, Henk W. M. **An Integral Model for Pool Spreading, Vaporisation and Dissolution of Hydrocarbon Mixtures**. IChemE. SYMPOSIUM SERIES NO. 158, Hazards XXIII. 2012.
- FISCHER, H. B.; LIST, E. J.; KOH, R. C. Y.; IMBERGER, J.; BROOKS, N. H. **Mixing in inland and coastal waters**, Academic Press, New York. 1979.
- FORESTER, H. K.; ZUBER, N. **Growth of a vapor bubble in a superheated liquid**. J. Applied Physics, 25(4):474 – 478, 1954.
- FROHN, Arnold; ROTH, Norbert. **Dynamics of Droplets**. 2000;
- FUDOLI, J. U. **M5 D1 - Proteção Contra Incêndios e Explosões II. Classificação de Áreas para Equipamentos Elétricos**. Pitágoras Pós-Graduação, 2012.

- FTHENAKIS, Vasilis M. **Prevention and Control of Accidental Releases of Hazardous Gases**. Wiley; 1 edition. 1993.
- GREEN, Don W.; PERRY, Rober H. **Perry's Chemical Engineers' Handbook, 8° Edition**. 2008.
- HANNA, S.; BRITTER, R.; LEUNG, J.;WEIL, J. **Toxic Industrial Chemical (TIC) Source Emissions Model Improvements for Pressurized Liquefied Gases**. Journal Paper Source Models. 2009.
- HEALTH & SAFETY LABORATORY. **Explosive Atmospheres - Classification of Hazardous Areas (Zoning) and Selection of Equipment**. 2018.
- HUSSEIN, H.J.; CAPP, S.P.; GEORGE, W.K. **Velocity measurements in a highReynolds-number, momentum-conserving, axisymmetric, turbulent jet**. J. Fluid Mech. 258, 31-75, 1994.
- IBARS, F. E.; TORRENT, J.G.. **Manual Práctico Clasificación de Zonas em Atmosferas explosivas**. Colegio de Ingenieros Tecnicos Industriales de Barcelona - CETIB. Espanha, 2005.
- ICHARD, Mathieu; HANSEN, Olav; MELHEIM, Jens. **Modelling of Flashing Releases Around Buildings**. 2009.
- ICHARD, Mathieu. **Numerical computations of pressurized liquefied gas releases into the atmosphere**. Tese de doutorado. University of Bergen. February, 2012.
- ILANGO VAN, V. **Far Field Evolution of Momentum Driven and Scalar Dominated Flow Field**. *Journal of Applied Fluid Mechanics*, Vol. 9, No. 6, pp. 3045-3051, 2016.
- INTERNACIONAL ELECTROTECHNICAL COMMISSION, **IEC 60079-10-1/Ed2: Explosive atmospheres – Part 10-1: Classification of Areas – Explosive Gas Atmospheres**. Geneva, 2015.
- JESPEN, Torben. **ATEX—Explosive Atmospheres Risk Assessment, Control and Compliance**. 2016.
- JOHNSON, D. W.; DIENER, R. **Prediction of aerosol formation from the release of pressurized, superheated liquids to the atmosphere**. Hazards XI, 87-104. 1991.
- JOHNSON, D.; WOODWARD, J. **Release: a model with data to predict aerosol rainout in accidental releases**. A CCPS concept book. American Institute of Chemical Engineers, 1999.
- JORDÃO, Dácio de Miranda. **Manual de Instalações Elétricas em Industrias Químicas, Petroquímicas e de Petróleo: Atmosferas Explosivas**. 3ª edição. Rio de Janeiro: Qualitymark, 2002.
- JORDÃO, D. M.; FRANCO, L. R. **Prevenção Contra Explosões e Outros Riscos**. Curitiba: PETROBRAS: UnicenP, 2002.
- KATAOKA, Kunio; SHUNDOH, Hiroyuki; MATSUO, Hitoshi. **A Generalized Model of the Development of Nonitothermal, Axisymmetric Free Jets**. Journal of Chemical Engineering of Japan. Vol. 15, nº 1, 1982.
- KAY, P. J., BOWEN, P. J., AND WITLOX, H. W. **Sub-cooled and flashing liquid jets and droplet dispersion II. scaled experiments and derivation of droplet size correlations**. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 23(6):849 – 856, 2010.

- KOLAITIS, D.; FOUNTI, M. **Comparing Evaporation Rates of Single Suspended Droplets**. 10th Workshop on Two-Phase Flow Predictions, Merseburg-Halle, Germany, April 2002.
- KUKKONEN, J. **Modelling source terms for the atmospheric dispersion of hazardous substances**, Commentationes Physico-Mathematicae 115/1990, Finnish Society of Sciences and Letters, Helsinki, 1990
- KUPHALDT, Tony R. **Lessons In Industrial Instrumentation**. 2^a. ed.
- LACOME, Jean-Marc; LEMOFACK, Cédric; REVEILLON, Julie; DEMOULIN, F. X.. **Numerical modelling of flashing liquid jets due to leakage of liquefied gas storage**. 43. ESReDA Seminar on Land Use Planning and Risk-Informed Decision Making "Aménagement du Territoire et Prise de Decision en Maitrise des Risques", Oct 2012, Rouen, France. pp.NC, 2012.
- LACOME, J.M; LEMOFACK, C; REVEILLON, J; DEMOULIN, F.X. **Numerical modelling of flashing liquid jets due to leakage of liquefied gas storage**. ESReDA Seminar on Land Use Planning and Risk-Informed Decision Making "Aménagement du Territoire et Prise de Décision en Maîtrise des Risques", Rouen, França, Oct 2014.
- LACOME, J-M; LEMOFACK, C; JAMOIS, D; REVEILLON, J; DURET, B; DEMOULIN, F-X. **Experimental data and numerical modeling of flashing jets of pressure liquefied gases**. Proc Safety Prog. 2020. <https://doi.org/10.1002/prs.12151>
- LEES, F.P. **Loss Prevention in the process industries: hazard identification, assessment and control**. Second Edition, Butterworth-Heinemann, Oxford, 1996.
- LEONG, M.Y.; MCDONELL, V.G.; SAMUELSEN, G.S. NASA/CR—2000-210467. **Mixing of an Airblast-Atomized Fuel Spray Injected into a Crossflow of Air**. 2000.
- LEUNG, J C. **The omega method for discharge rate evolution**. United States: 1996.
- LIENHARD, J. H.; DAY, J. B. **The breakup of superheated liquid jets**. *Journal of Basic Engineering*, 92(3):515–521, 1970.
- LIM, B.H.; NG, E.Y.K. **Model for Cryogenic Flashing LNG Leak**. LNG Leak. Appl. Sci. 2021.
- MAGISON, Ernest C. **Electrical Instruments in Hazardous Locations**. ed. 4^a. Research Triangle Park, NC, 1998.
- MCMILLAN, A. **Electrical Installations in Hazardous Areas**. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1998.
- MELHEM, G. A.; SAINI, R. **A Model for the Dispersion of Two - Phase Multicomponent Jets**. Paper presented at The AIChE Process Plant Safety Symp., Houston, TX, Fevereiro, 1992.
- MURALIDHAR, R.; JERSEYA, G.R; KRAMBECK, F.J.; SUNDARESANB, S. **A two-phase release model for quantifying risk reduction for modified HF alkylation catalysts**. Journal of Hazardous Materials 44, 141-183, 1995.
- NETO, Francisco A. O. **Instalações Elétricas em Atmosferas Potencialmente Explosivas: Noções Básicas**. Mossoró, Rio Grande do Norte. 2010.
- NIKMO, Juha; KUKKONE, Jaakko; VESALA, Timo; KULMALAB, Markku. **A model for mass and heat transfer in an aerosol cloud**. Journal of Hazardous Materials 38, p. 293-311, 1994.

- NJZ Lighting, **Definition of hazardous area classification (ATEX&IECex)**. 2016. Disponível em: < <https://www.njzlighting.com/lighting-industry/hazardous-location-zones.html>>. Acesso em, 11 de novembro de 2021.
- NR 10 - **Segurança em Instalações e Serviços em eletricidade**. 2016.
- NR 20 - **Segurança e Saúde no Trabalho com Inflamáveis e Combustíveis**. 2018
- OGUZ, H.N.; SADHAL, S.S. **Effects of soluble and insoluble surfactants on the motion of drops**. J. Fluid Mech., Vol. 194, pp. 563-579, 1988.
- OLIVEIRA, T.C.L.; NETO, A.T.P.; ALVES, J.J.N. **CFD Simulation of Flashing Jet Applied to Area Classification**. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 2018.
- OTSUKA, A. H. **Análise Quantitativa da Extensão de Áreas Classificadas**. Universidade Federal de Sergipe. Dissertação de Mestrado. Sergipe, 2011.
- PAPADOURAKIS, ANTONIS; CARAM, HUGO S.; BARNER, CHRISTINE L. **Upper and lower bounds of droplet evaporation in two-phase jets**. J. Loss Prev. Process Ind., Vol14, Janeiro 1991.
- PATIL, Rahul. **Hazardous area classification systems & the types of protection techniques**. 2020. Disponível em: < <https://www.linkedin.com/pulse/hazardous-area-classification-systems-types-protection-rahul-patil/>>. Acesso em: 02 junho 2021.
- PETROBRAS N-2918. **Norma Técnica Petrobras: Atmosferas Explosivas - Classificação de Áreas**. CONTEC, 2017.
- POLANCO, G. **Phase change within flows from breaches of liquefied gas pipelines**. PhD Thesis, Coventry, UK. 2008.
- POLING, Bruce E.; PRAUSNITZ, John M.; O'CONNELL, John P. **The Properties of Gases and Liquid**. 5ª edição, McGRAW-HILL. 2001.
- QUADVENT 2 Technical Manual**. Health & Safety Laboratory. Versão 2.0, julho, 2016.
- RAJ, P.; KALELKAR, A. **Assessment models in support of the hazard assessment handbook**. Cambridge, Massachusetts: Arthur D. Little, Inc. for the Department of Transportation U.S. 1974.
- RIBEIRO, M.D.; BIMBATO, A.M.; ZANARDI, M.A.; BALESTIERI, J.A.P. **A Preliminary Study on Simulations of a Single Jet from The Ecn "Spray G" Test Case**. 10th ABCM Spring School on Transition and Turbulence September 19th to 23rd, São José dos Campos – SP, 2016.
- RICOU F. P.; SPALDING D. **Measurements of entrainments by axisymmetrical turbulent jets**. J. Fluid Mech., 21-32. 1981.
- ROBERVAL BULGARELLI. **O Ciclo Total de Vida das Instalações em Atmosferas Explosivas**. 1ª. ed.
- ROTONDO, Murillo. **Módulo 5 - Combate a Princípios de Incêndio**. Programa Brigadas Escolares, Governo do Estado do Paraná, 2019.

- SAZHIN, S.; ABDELGHAFAR, W.; SAZHINA, E.; HEIKAL, M. **Models for droplet transient heating: Effects on droplet evaporation, ignition, and break-up.** International Journal of Thermal Sciences, v. 44, n. 7, p. 610 – 622, 2005.
- SCHRAM, Peter J., EARLEY, Mark W. **Electrical Installations in Hazardous Locations.** 3ª ed. USA, Massachusetts, Quincy: USA National Fire Protection Association, 1993.
- SILVA, José. **Atmosferas Explosivas: instalação de equipamentos elétricos em áreas classificadas.** 2ª edição. Jundiaí, Paco Editorial: 2017.
- SOARES, G. J.; GOMES, V. M.; CHAVES, F. S.; ELER, E. O. **Instalações Elétricas em Atmosfera Explosiva.** Centro Universitário de Belo Horizonte, Belo Horizonte – MG, 2015.
- SOUZA, A. O.; LUIZ, A. M.; NETO, A.T.P.; ARAUJO, A.C.B.; SILVA, H.B. **A New Correlation for Hazardous Area Classification Based on Experiments and CFD Predictions.** American Institute of Chemical Engineers Process Saf Prog, vol. 38, nº 1, pg. 21-26, 2018.
- TAM, V.H.Y.; WANG, M.; SAVVIDES, C.N.; TUNC, E.; FERRARIS, S.; WEN, J.X. **Simplified Flammable Gas Volume Methods for Gas Explosion Modelling from Pressurized Gas Releases: A comparison with large scale experimental data.** IChemE, 2008.
- TEMKIN, S.; KIM, S.S. **Droplet motion induced by weak shock waves.** J. Fluid Mech., Vol. 96, pp. 133-157, 1980.
- TEMKIN, S.; MEHTA, H.K. **Droplet drag in a accelerated flow.** J. Fluid Mech., Vol. 116, pp. 297-313, 1982.
- THRING, M. W.; NEWBY, M. P. **COMBUSTION Length of Enclosed Turbulent Jet Flames.** 1953.
- WITLOX, H. **PVAP- Theory document.** London: DNV Technica (Phast Technical Reference). 2008.
- WITLOX, Henk W.M.; HARPER, M.; OKE, A.; BOWEN, P.; KAY, P.; JAMOIS, D.; PROUST, C. **Two-Phase Jet Releases and Droplet Dispersion: Scaled and Large-Scale Experiments, Droplet-Size Correlation Development and Model Validation.** 16th Conference on Air Pollution Meteorology. Atlanta, 2010.
- WOODWARD, J.L.; PAPADOURAKIS, A. in: Int. Conf. and Workshop on Modeling and Mitigating the Consequence of Accidental Releases of Hazardous Materials, New Orleans, LA, 2c-24 May 1991, p. 147.
- WRIGHT-JANOCHA, Rob. The importance of hazardous area classification. **Hazardous Area Solutions a citywide group business,** 2015. Disponível em: <<https://www.hazardousareasolutions.com.au/2015/11/the-importance-of-hazardous-area-classification>>. Acesso em: 02 junho 2021.
- XU, G. E ANTONIA, R.A. **Effect of different initial conditions on a turbulent round free jet.** Exp. Fluids 33, 677-683, 2002.
- YUEN, M.C; CHEN, L.W. **On drag of evaporating liquid droplets.** Comb. Sci. Tech., 14, 147-154. 1976.

APÊNDICE

APÊNDICE A – Correlações para as Propriedades Termodinâmicas e de Transporte.

Quadro A.1 - Correlações para as propriedades termodinâmicas e de transporte.

Definição	Correlação	Unidade
Densidade da fase vapor	$\rho_v = \frac{P.MW}{R.T}$ (A.1)	kg/m^3
Densidade da fase líquida	$\rho_l = \left\{ \frac{R1}{R2[1+(1-T/R3)^{R4}]} \right\} MW.1000$ (A.2)	kg/m^3
Densidade da água líquida	$\rho_l = (17.863 + 58.606\tau^{0.35} - 95.396\tau^{2/3} + 213.89\tau - 141.26\tau^{4/3}) MW_{\text{água}}.1000$ (A.3) Com $\tau = 1 - T/647.096$	kg/m^3
Calor latente de vaporização	$L_v = \frac{[L1(1 - T_r)^{L2+L3T_r+L4T_r^2+L5T_r^3}]}{MW * 1000}$ (A.4) Com $T_r = \frac{T}{T_c}$	J/kg
Capacidade calorífica do vapor	$Cp_v = \frac{C1 + C2 \left[\frac{C3/T}{\sinh(C3/T)} \right]^2 + C4 \left[\frac{C5/T}{\cosh(C5/T_T)} \right]^2}{MW.1000}$ (A.5)	$J/kg.K$

Quadro A.1 - Correlações para as propriedades termodinâmicas e de transporte (continuação).

Definição	Correlação	Unidade
<p>Capacidade calorífica do líquido</p>	<p>Se o componente for amônia, propano, heptano (consulte Green e Perry (2008)).</p> $Cp_l = \left[\frac{Cp1^2}{T_{cp}} + Cp2 - 2Cp1.Cp3.T_{cp} - Cp1.Cp4.T_{cp}^2 - \frac{Cp3^2 T_{cp}^3}{3} - \frac{Cp3.Cp4.T_{cp}^4}{2} - \frac{Cp4^2 T_{cp}^5}{5} \right] \frac{1}{MW * 1000} \quad (A.6)$ <p>Com $T_{cp} = 1 - \frac{T}{T_c}$</p> <p>Para todos os outros utiliza-se a Equação A.7.</p> $Cp_l = \frac{Cp1 + Cp2.T + Cp3.T^2 + Cp4.T^3 + Cp5.T^4}{MW * 1000} \quad (A.7)$	<p>J/kg.K</p>
<p>Pressão de saturação</p>	$P_{sat} = e^{(P1+P2/T+P3 \ln T+P4(T^{P5}))} \quad (A.8)$	<p>Pa</p>
<p>Viscosidade dinâmica do vapor</p>	$\mu_v = \frac{\mu1.T^{\mu2}}{(1 + \mu3/T + \mu4/T^2)} \quad (A.9)$	<p>Pa.s</p>
<p>Viscosidade dinâmica do líquido</p>	$\mu_l = e^{(\mu11+\frac{\mu12}{T}+\mu13 \ln T+\mu14.T^{\mu15})} \quad (A.10)$	<p>Pa.s</p>
<p>Condutividade térmica do vapor</p>	$k_v = \frac{k1.T^{k2}}{(1 + k3/T + k4/T^2)} \quad (A.11)$	<p>W/m.K</p>

Quadro A.1 - Correlações para as propriedades termodinâmicas e de transporte (continuação).

Definição	Correlação	Unidade
Condutividade térmica do líquido	$k_l = kl1 + kl2.T + kl3.T^2 + kl4.T^3 + kl5.T^4 \quad (A.12)$	W/m.K
Tensão superficial do líquido	$\sigma_l = \sigma 1. \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \left[\sigma 2 + \sigma 3. \frac{T}{T_c} + \sigma 4. \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 + \sigma 5. \left(\frac{T}{T_c}\right)^3\right] \quad (A.13)$	N/m
Coeficiente de difusão	$D_{AB} = 10^{-4} \cdot \frac{\left[3.03 - \left(\frac{0.98}{\sqrt{MW_{AB}}}\right)\right] 10^{-3} \cdot T^{3/2}}{P(\text{bar}) \sqrt{MW_{AB}} \vartheta_{AB}^2 \varphi_D} \quad (A.14)$ <p>Com $\vartheta_{AB} = \frac{\vartheta_A + \vartheta_B}{2}$, $\vartheta_A = 3.62 \text{ \AA}$ (para ar), $\vartheta_B = 1.18 V_b^{1/3}$ e $V_b = \frac{MW}{\rho_l(T_b)} 10^5$ (para componente liberado). $MW_{AB} = 2 \left(\frac{1}{MW_A \cdot 1000} + \frac{1}{MW_B \cdot 1000}\right)^{-1}$, $\varphi_D = \frac{1.06036}{(T^*)^{0.15610}} + \frac{0.19300}{\exp(0.47635.T^*)} + \frac{1.03587}{\exp(1.52996.T^*)} + \frac{1.76474}{\exp(3.89411.T^*)}$, $T^* = \left(\frac{k}{\varepsilon_{AB}}\right) T$, $\frac{\varepsilon_{AB}}{k} = \sqrt{\varepsilon_A \varepsilon_B}$. Para ar $\frac{\varepsilon_A}{k} = 97 \text{ K}$, para os demais componentes $\frac{\varepsilon_B}{k} = 1.15 T_b$.</p>	m ² /s

APÊNDICE B – Parâmetros e Propriedades.

Tabela B.1- Valores dos parâmetros e de algumas propriedades dos componentes.

Propriedade	Parâmetro	Componente				
		Ar	Propano	Butano	Pentano	Hexano
MW	-	0.02896	0.0441	0.05812	0.0722	0.08618
LII/LEL	-	-	2.1	1.8	1.4	1.1
Temperatura crítica (T_c)	-	-	369.83	425.12	469.734	507.534
Pressão crítica (P_c)	-	-	4256007.6	3796000	3367436	3027962
Fator acêntrico (w)	-	-	0.15232	0.19949	0.25062	0.30044
ρ_l	R1	-	1.3757	1.0677	0.84947	0.70824
	R2	-	0.27453	0.27188	0.26726	0.26411
	R3	-	369.83	425.12	469.7	507.6
	R4	-	0.29359	0.28688	0.27789	0.27537
L_v	L1	-	29209000	36238000	45087000	43848000
	L2	-	0.78237	0.8337	0.95886	0.34057
	L3	-	-0.77319	-0.82274	-0.92384	0.063282
	L4	-	0.39246	0.39613	0.39393	-0.01704
	L5	-	0	0	0	0
Cp_v	C1	28958	51920	71340	88050	104400
	C2	9390	192450	243000	301100	352300
	C3	3012	1626.5	1630	1650.2	1694.6
	C4	7580	116800	150330	189200	236900
	C5	1484	723.6	730.42	747.6	761.6
Cp_l	Cp1	-	62.983	191030	159080	172120
	Cp2	-	113630	-1675	-270.5	-183.78
	Cp3	-	633.21	12.5	0.99537	0.88734
	Cp4	-	-873.46	-0.03874	0	0
	Cp5	-	0	4.61E-05	0	0
P_{sat}	P1	21.662	59.078	66.343	78.741	104.65
	P2	-692.39	-3492.6	-4363.2	-5420.3	-6995.5
	P3	-0.392	-6.0669	-7.046	-8.8253	-12.702
	P4	4.7574e-3	1.0919e-5	9.45E-06	9.62E-06	1.24E-05
	P5	1	2	2	2	2
μ_v	μ_1	1.425e-6	4.9054e-08	3.44E-08	6.34E-08	1.75E-07
	μ_2	0.5039	0.90125	0.94604	0.84758	0.70737
	μ_3	108.3	0	0	41.718	157.14
	μ_4	0	0	0	0	0

Tabela B.1- Valores dos parâmetros e de algumas propriedades dos componentes (continuação).

Propriedade	Parâmetro	Componente				
		Heptano	Octano	Nonano	Decano	Água
MW	-	0.1002	0.11423	0.1283	0.1423	0.01802
LII/LEL	-	1	1	0.7	0.7	0
Temperatura crítica (T_c)	-	540.076	568.782	594.127	618.05	647.1081
Pressão crítica (P_c)	-	2735866	2486203	2293158	2103905	22076478
Fator acêntrico (w)	-	0.34977	0.39758	0.44822	0.4856	0.34425
ρ_l	R1	0.61259	0.5266	0.46321	0.41084	-13.851
	R2	0.26211	0.25693	0.25444	0.25175	0.64038
	R3	540.2	568.7	594.6	617.7	-0.00191
	R4	0.28141	0.28571	0.28571	0.28571	1.82E-06
L_v	L1	50014000	55180000	60370000	66126000	52053000
	L2	0.38795	0.38467	0.38522	0.39797	0.3199
	L3	0	0	0	0	-0.212
	L4	0	0	0	0	0.25795
	L5	0	0	0	0	0
Cp_v	C1	120150	135540	151750	167200	33363
	C2	400100	443100	491500	535300	26790
	C3	1676.6	1635.6	1644.8	1614.1	2610.5
	C4	274000	305400	347000	378200	8896
	C5	756.4	746.4	749.6	742	1169
Cp_l	Cp1	61.26	224830	383080	278620	276370
	Cp2	314410	-186.63	-1139.8	-197.91	-2090.1
	Cp3	1824.6	0.9589	2.7101	1.0737	8.125
	Cp4	-2547.9	0	0	0	-0.01412
	Cp5	0	0	0	0	9.37E-06
P_{sat}	P1	87.829	96.084	109.35	112.73	73.649
	P2	-6996.4	-7900.2	-9030.4	-9749.6	-7258.2
	P3	-9.8802	-11.003	-12.882	-13.245	-7.3037
	P4	7.21E-06	7.18E-06	7.85E-06	7.13E-06	4.17E-06
	P5	2	2	2	2	2
μ_v	μ_1	6.67E-08	3.12E-08	1.03E-07	2.64E-08	1.71E-08
	μ_2	0.82837	0.92925	0.77301	0.9487	1.1146
	μ_3	85.752	55.092	220.47	71	0
	μ_4	0	0	0	0	0

Tabela B.1- Valores dos parâmetros e de algumas propriedades dos componentes (continuação).

Propriedade	Parâmetro	Componente				
		Ar	Propano	Butano	Pentano	Hexano
μ_l	μ_{l1}	-	-17.156	-7.2471	-53.509	-56.569
	μ_{l2}	-	646.25	534.82	1836.6	2140.5
	μ_{l3}	-	1.1101	-0.57469	7.1409	7.5175
	μ_{l4}	-	-7.3439e-11	-4.66E-27	-1.96E-05	-1.77E-05
	μ_{l5}	-	4	10	2	2
k_v	k_1	3.1417e-4	-1.12	0.051094	-684.4	-650.5
	k_2	0.7786	0.10972	0.45253	0.764	0.8053
	k_3	-0.7116	-9834.6	5455.5	-	-
	k_4	2121.7	-7535800	1979800	0	0
k_l	kl_1	-	0.26755	0.27349	0.2537	0.22492
	kl_2	-	-0.00066457	-0.00071	-0.00058	-0.00035
	kl_3	-	2.774e-7	5.16E-07	3.44E-07	0
	kl_4	-	0	0	0	0
	kl_5	-	0	0	0	0
σ_l	σ_1	-	0.0506753901	0.05182	0.052109	0.052094
	σ_2	-	1.22222222	1.222222	1.222222	1.222222
	σ_3	-	1.68102627e-09	5.41E-10	1.20E-10	-2.00E-09
	σ_4	-	-1.8612364e-09	-6.01E-10	-1.34E-10	2.24E-09
	σ_5	-	7.5035714e-10	2.42E-10	5.38E-11	-8.96E-10

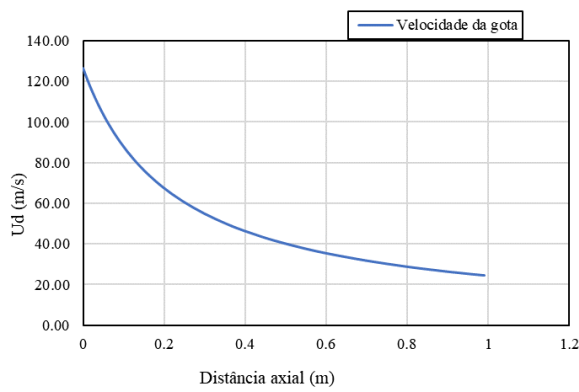
Tabela B.1- Valores dos parâmetros e de algumas propriedades dos componentes (continuação).

Propriedade	Parâmetro	Componente				
		Heptano	Octano	Nonano	Decano	Água
μ_l	μ_{l1}	-9.4622	-7.556	-68.54	9.6489	-52.843
	μ_{l2}	877.07	881.09	3165.3	1181.1	3703.6
	μ_{l3}	-0.23445	-0.52502	9.0919	-0.24367	5.866
	μ_{l4}	1.40E+22	4.63E+22	-1.35E-05	9.05E+34	-5.88E-29
	μ_{l5}	-10	-10	2	-15	10
k_v	k_1	-0.07003	-8758	-0.06577	-668.4	6.20E-06
	k_2	0.38068	0.8448	0.27198	0.9323	1.3973
	k_3	-7049.9	- 2.71E+10	-3482.3	- 4.07E+09	0
	k_4	-2400500	0	- 1580300	0	0
k_l	kl_1	0.215	0.2156	0.209	0.2063	-0.432
	kl_2	-0.0003	-0.00029	-0.00026	-0.00025	0.005726
	kl_3	0	0	0	0	-8.1E-06
	kl_4	0	0	0	0	1.86E-09
	kl_5	0	0	0	0	0
σ_l	σ_1	0.052069	0.051798	0.051569	0.051171	0.224658
	σ_2	1.222222	1.222222	1.222222	1.222222	1.222222
	σ_3	2.04E-10	-1.41E-13	1.97E-09	8.51E-11	-3.45E-10
	σ_4	-2.29E-10	1.68E-13	-2.21E-09	-9.61E-11	3.78E-10
	σ_5	9.13E-11	0	8.78E-10	3.79E-11	-1.53E-10

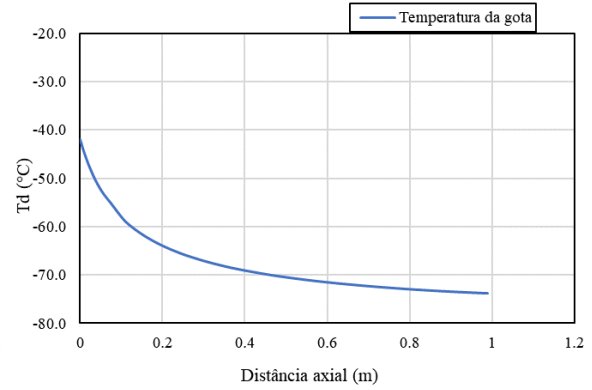
APÊNDICE C – Resultados Obtidos pela Simulação para o Projeto INERIS - FLIE.

C.1 Caso 1 – Propano

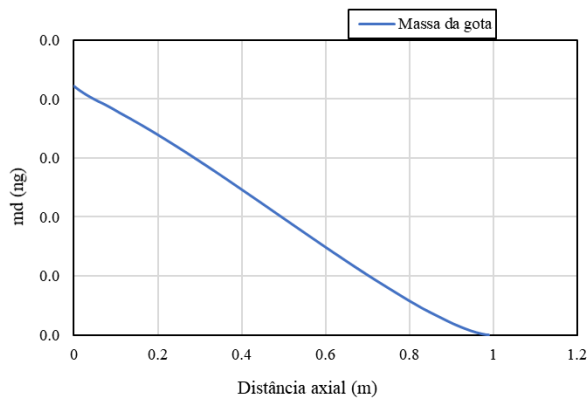
Figura C.1- Resultados para o caso 1: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (f) velocidade do gás na linha central.



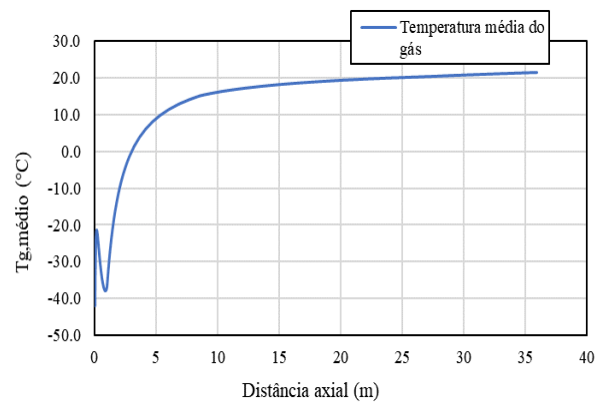
(a)



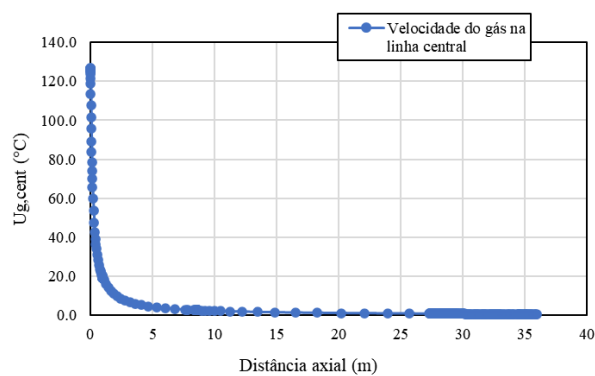
(b)



(c)



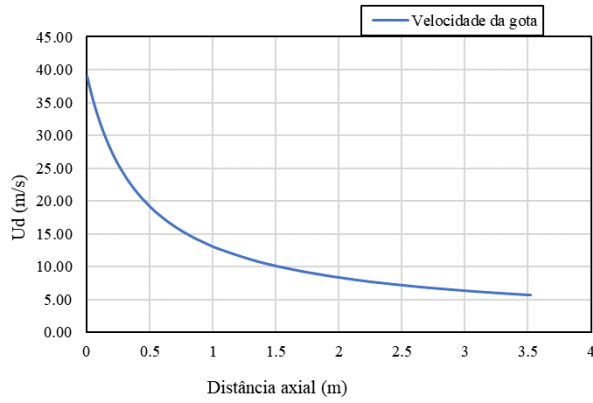
(d)



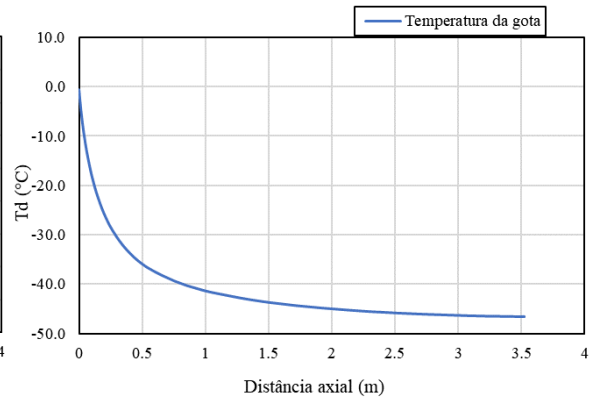
(e)

C.2 Caso 2 – Butano (X = 1.75)

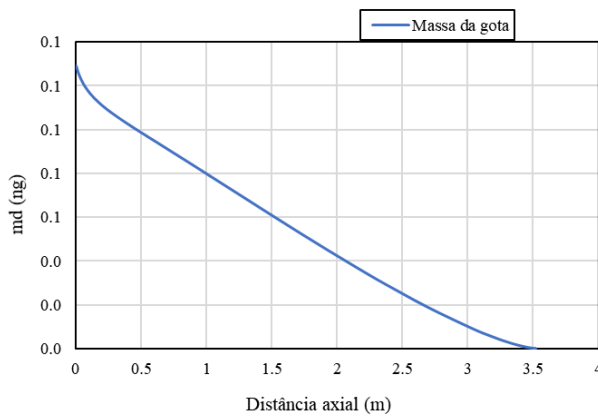
Figura C.2- Resultados para o caso 2: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (e) velocidade do gás na linha central.



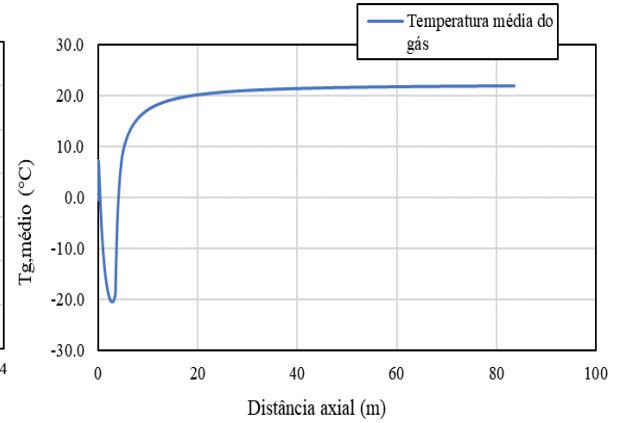
(a)



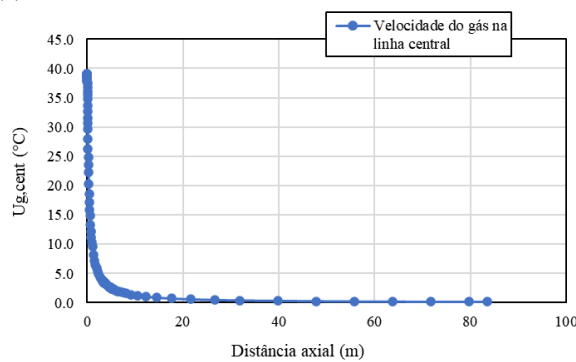
(b)



(c)



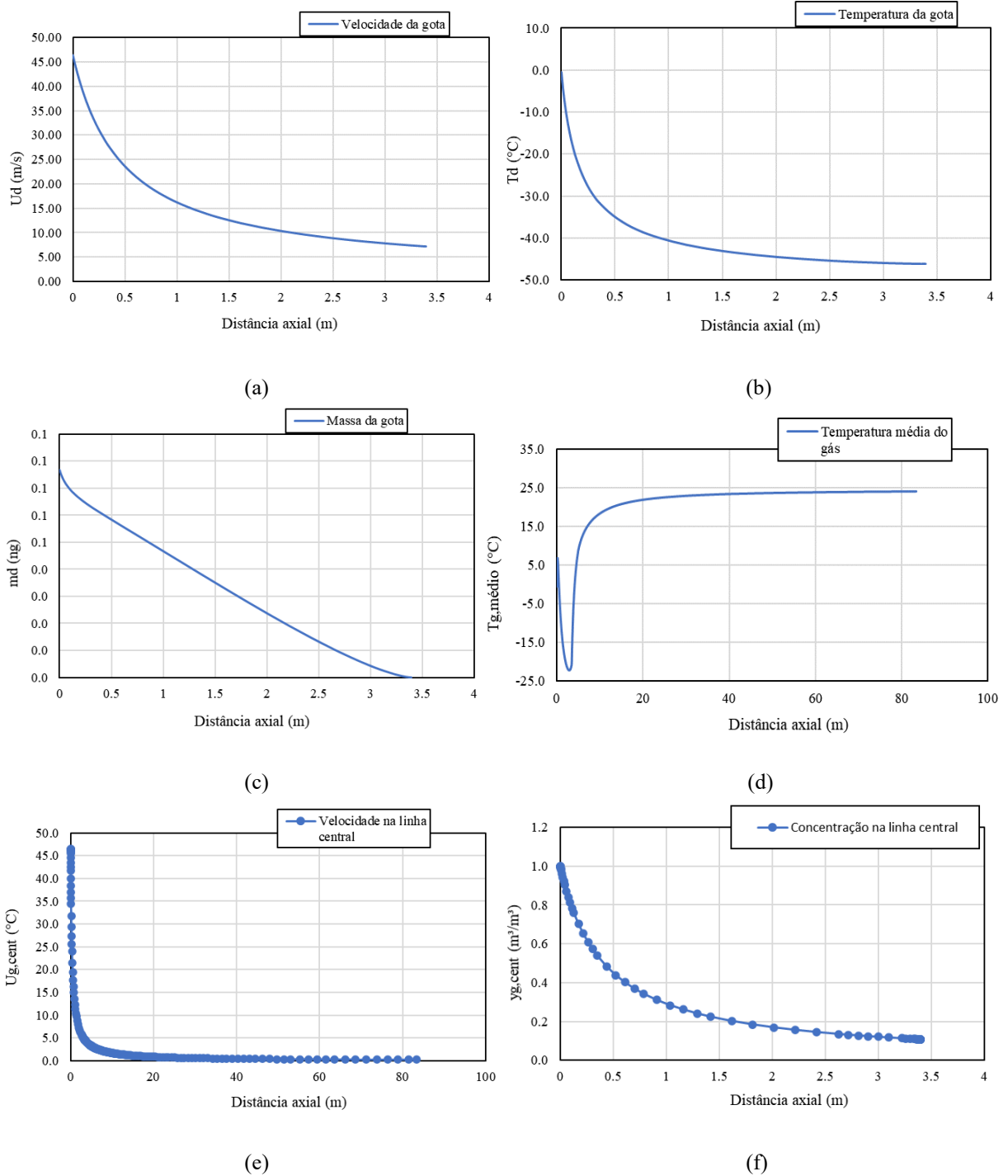
(d)

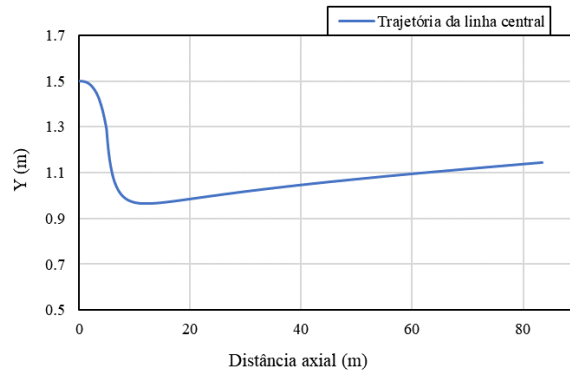


(e)

C.3 Caso 3 – Butano (X = 2.44)

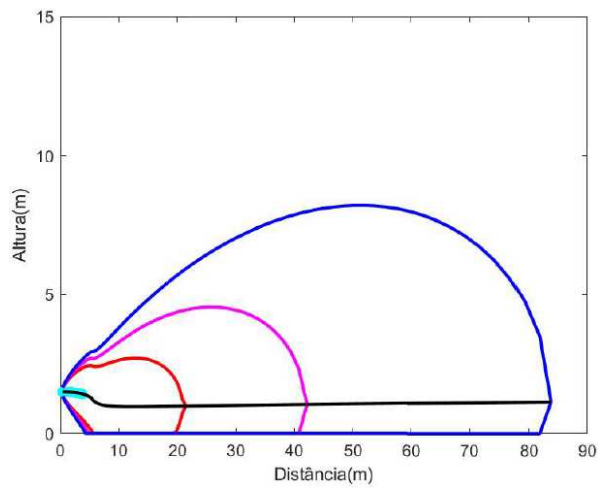
Figura C.3- Resultados para o caso 3: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (e) velocidade do gás na linha central; (f) concentração na linha central; (g) trajetória da linha central.



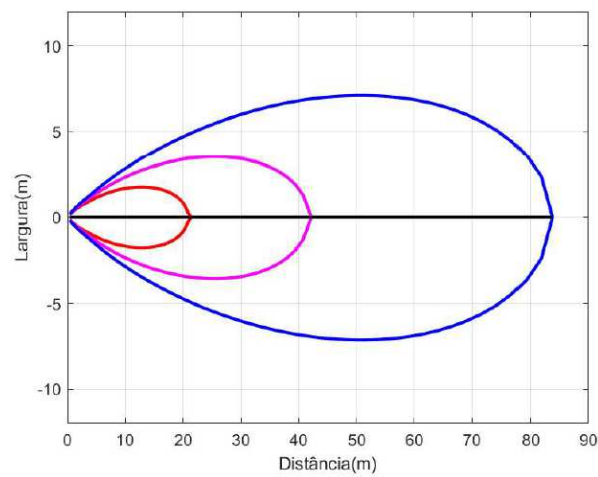


(g)

Figura C.4- Isolinhas para o caso 3: (a) pluma vertical (b) pluma lateral.



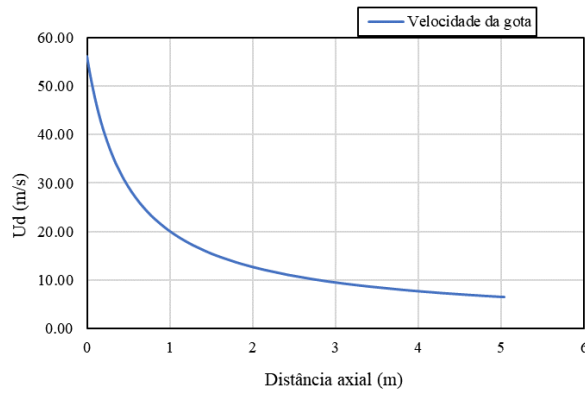
(a)



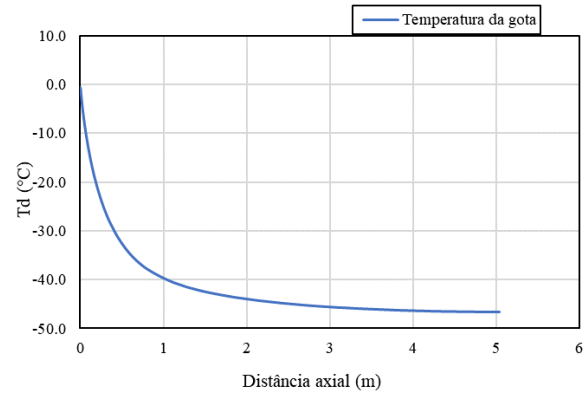
(b)

C.4 Caso 4 – Butano (X = 4)

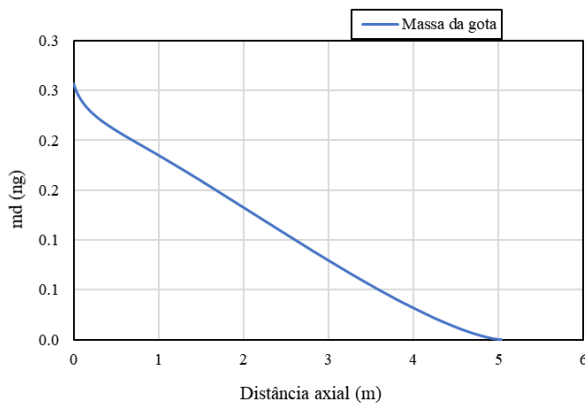
Figura C.5- Resultados para o caso 4: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (e) velocidade do gás na linha central; (f) concentração na linha central; (g) trajetória da linha central.



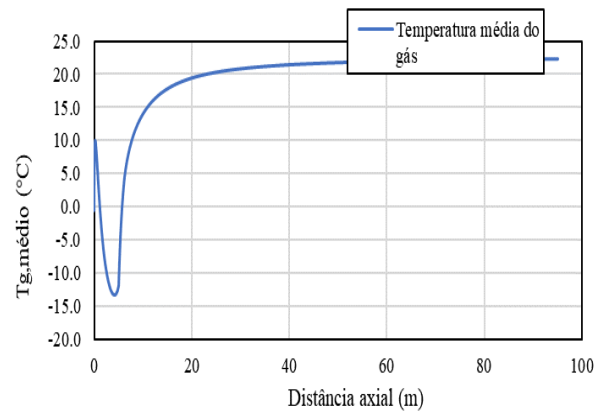
(a)



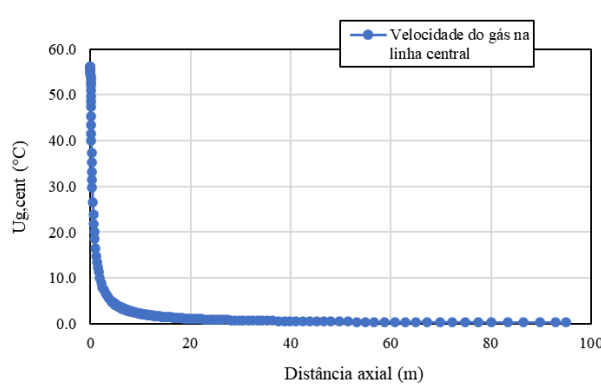
(b)



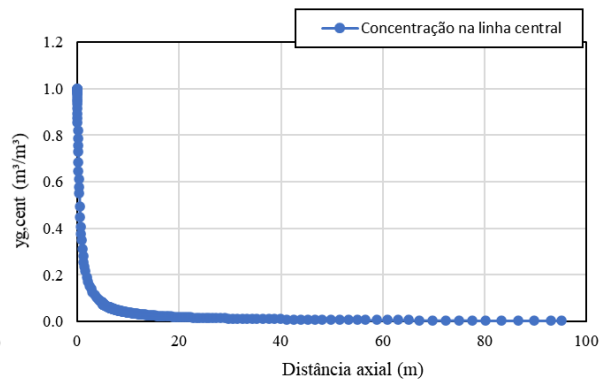
(c)



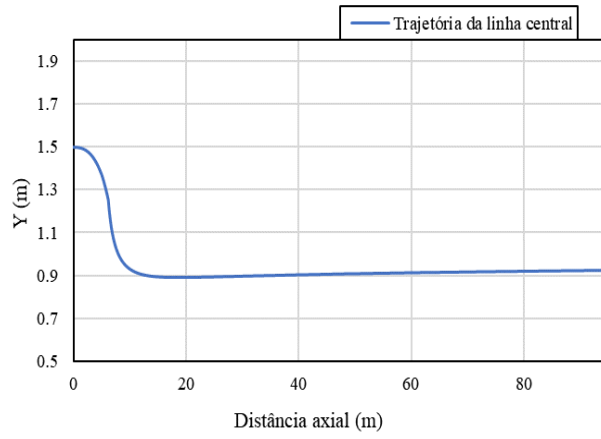
(d)



(e)

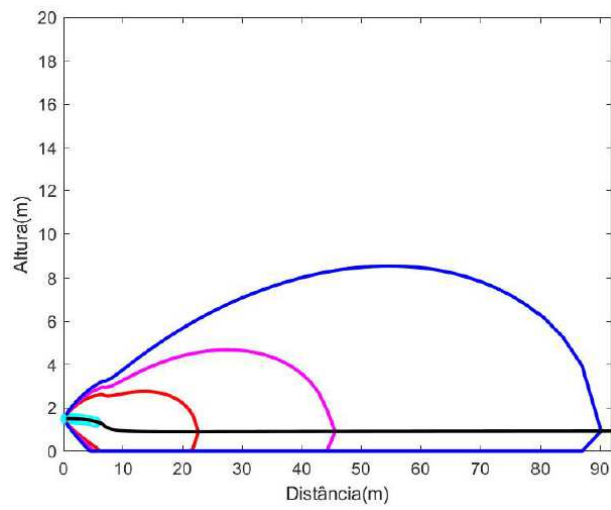


(f)

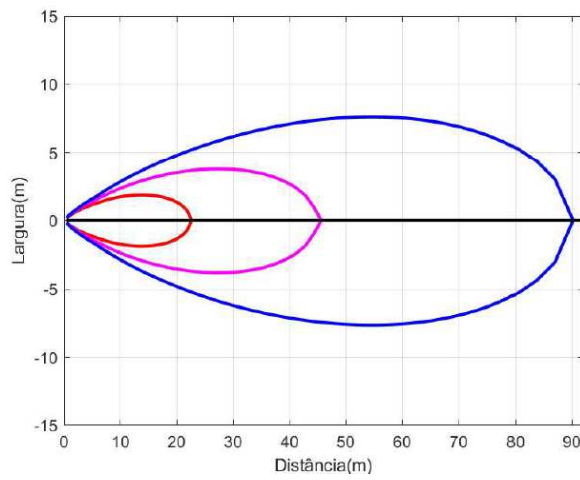


(g)

Figura C.6- Isolinhas para o caso 4: (a) pluma vertical (b) pluma lateral.



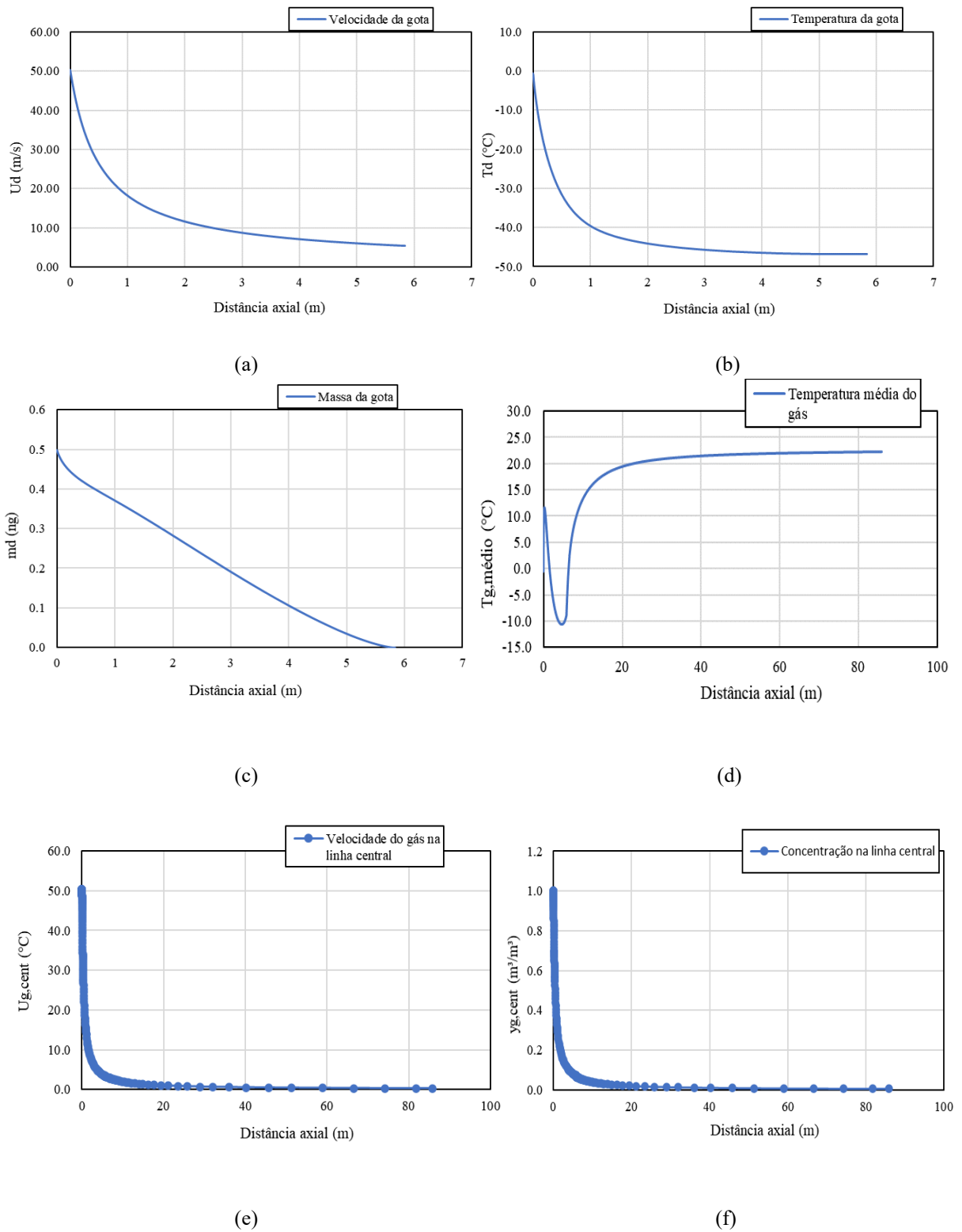
(a)

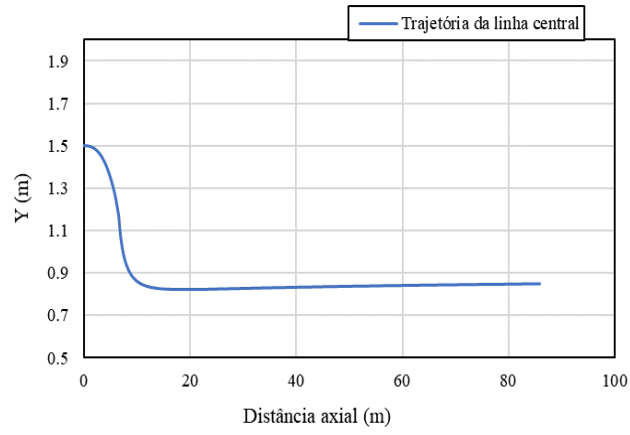


(b)

C.5 Caso 5 – Butano (X = 3.74)

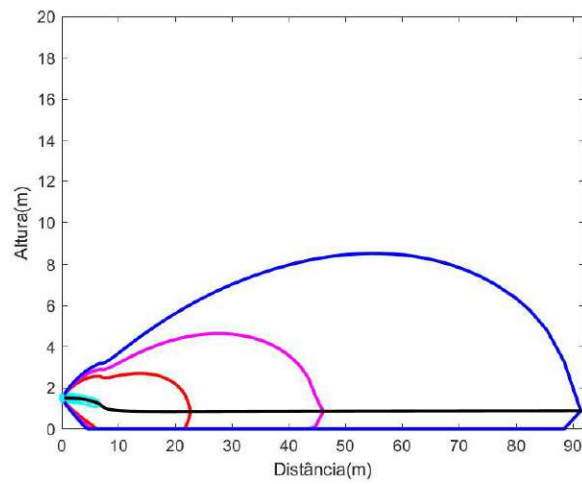
Figura C.7- Resultados para o caso 5: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (e) velocidade do gás na linha central; (f) concentração na linha central; (g) trajetória da linha central.



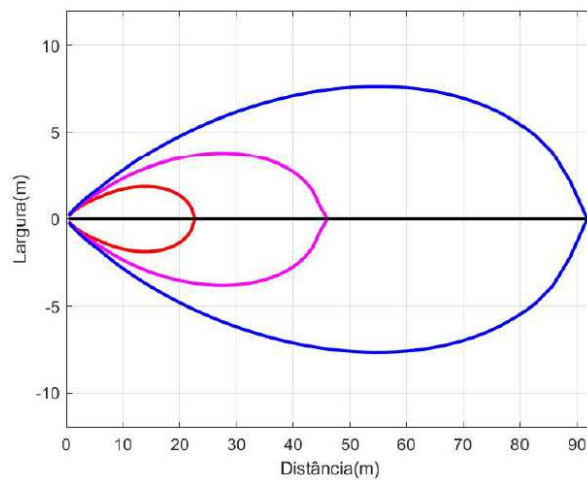


(g)

Figura C.8- Isolinhas para o caso 5: (a) pluma vertical (b) pluma lateral.



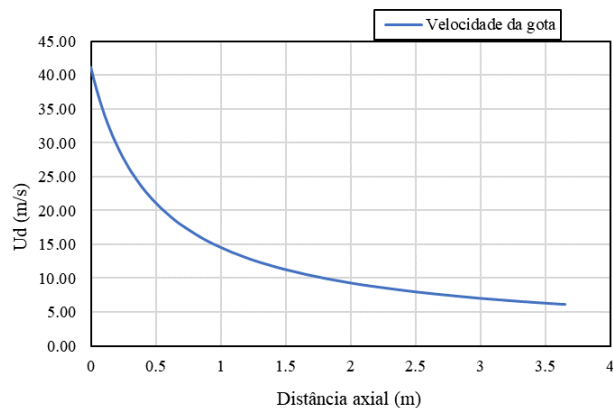
(a)



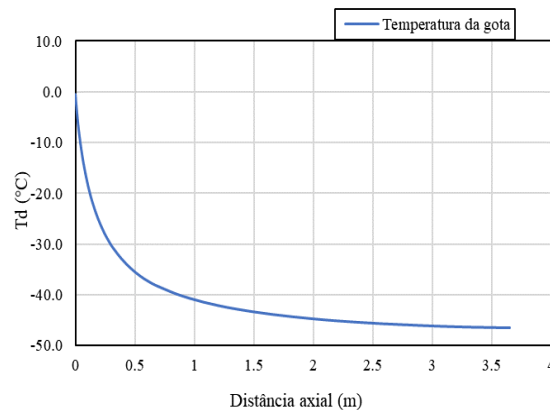
(b)

C.6 Caso 6 – Butano ($X = 2.32$)

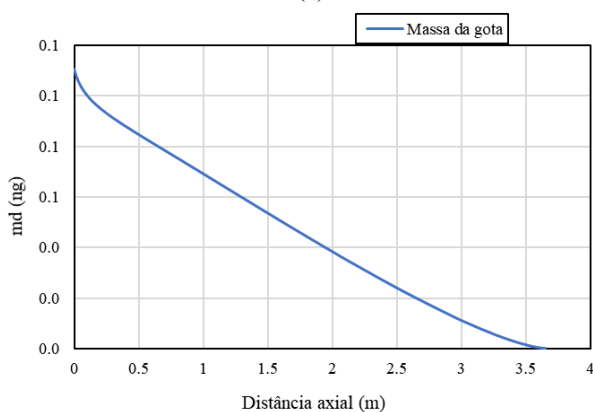
Figura C.9- Resultados para o caso 6: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (e) velocidade do gás na linha central; (f) concentração na linha central; (g) trajetória da linha central.



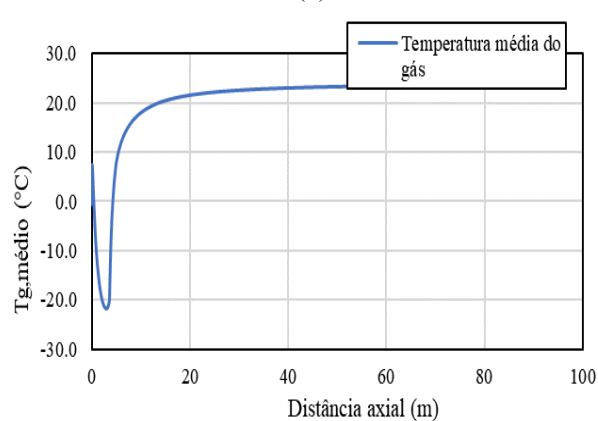
(a)



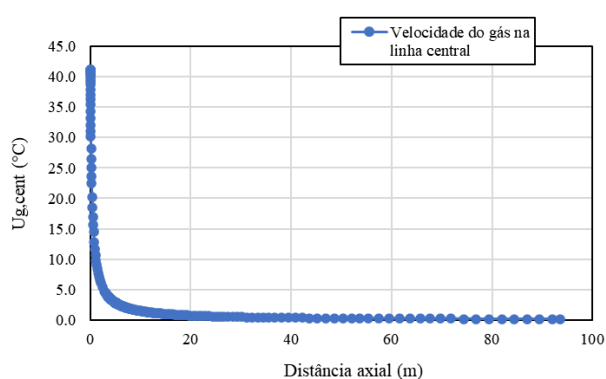
(b)



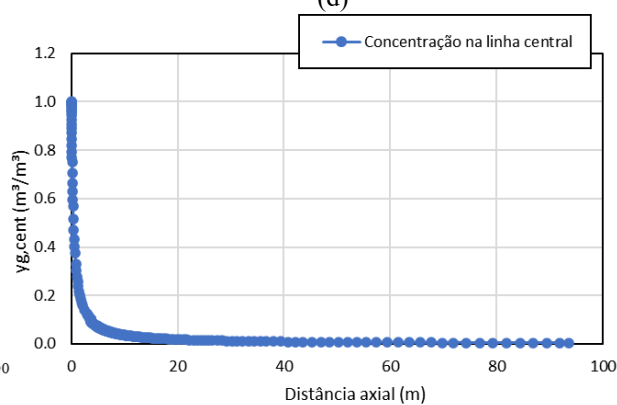
(c)



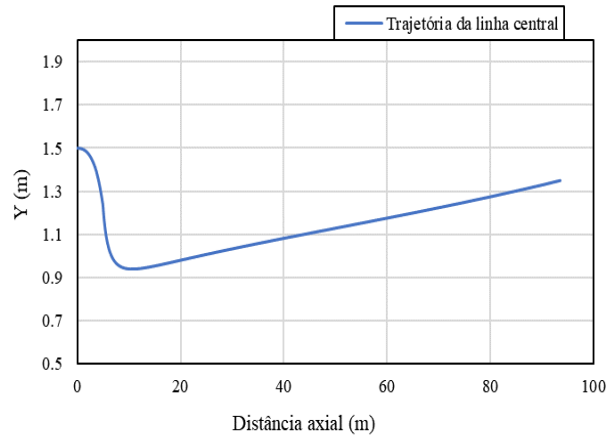
(d)



(e)

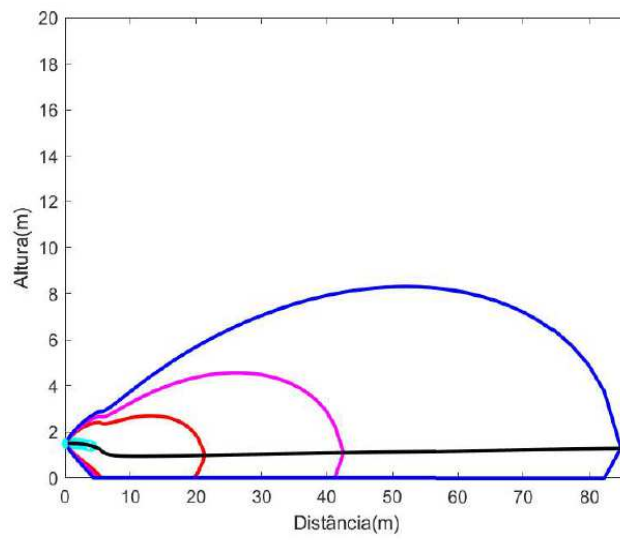


(f)

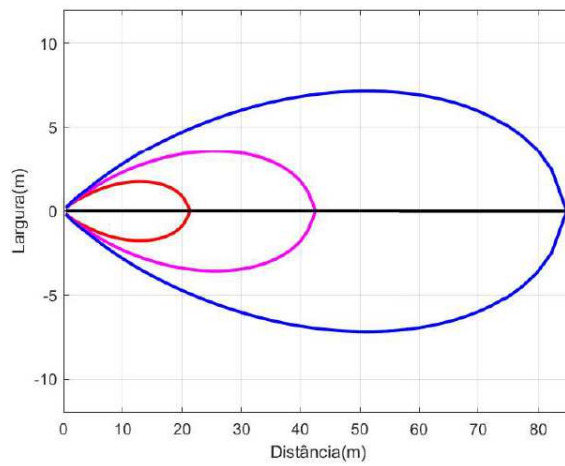


(g)

Figura C.10- Isolinhas para o caso 6: (a) pluma vertical (b) pluma lateral.



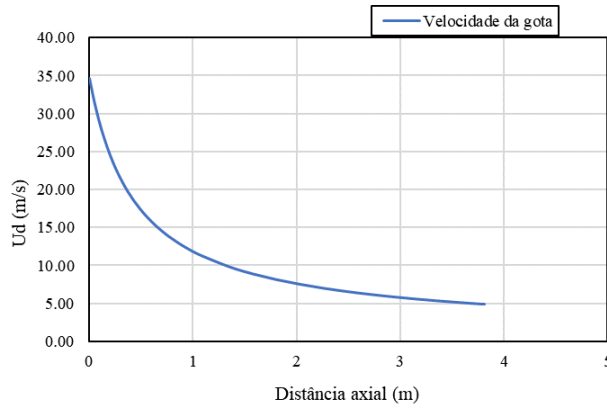
(a)



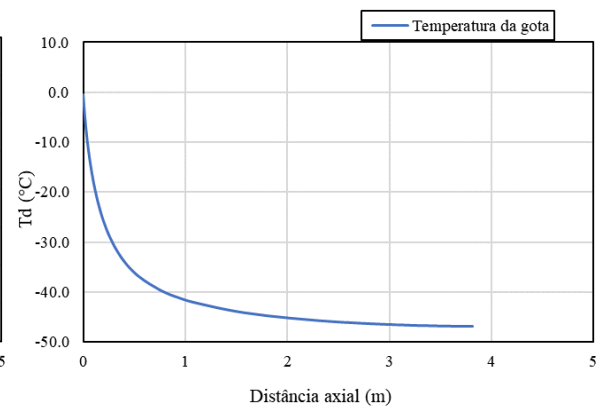
(b)

C.7 Caso 7 – Butano ($X = 1.72$)

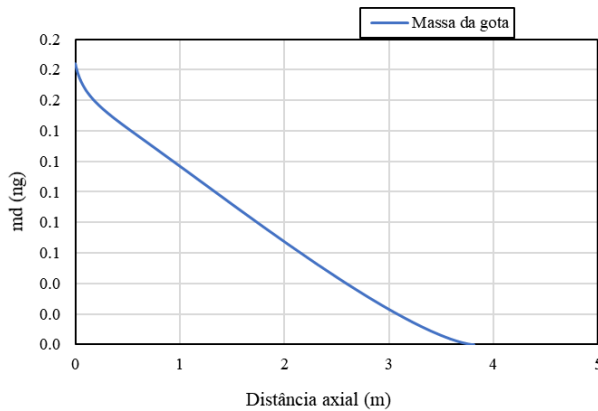
Figura C.11- Resultados para o caso 7: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (f) velocidade do gás na linha central; (g) concentração na linha central; (h) trajetória da linha central.



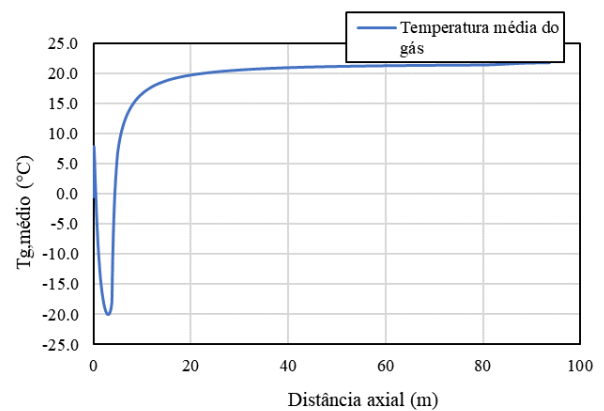
(a)



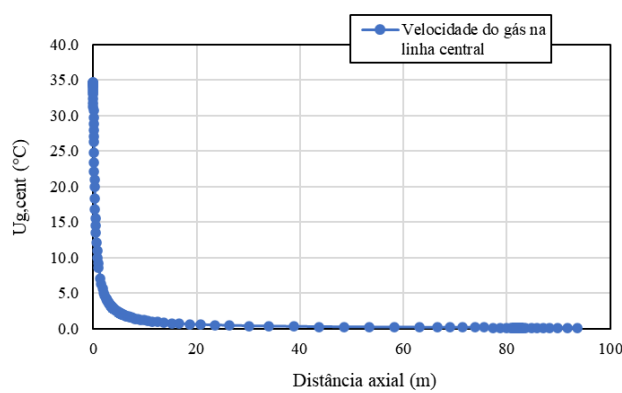
(b)



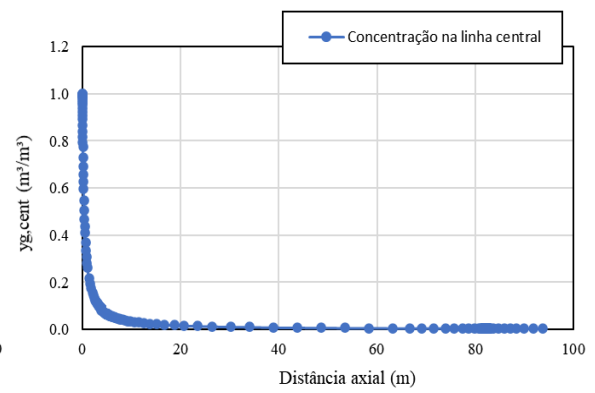
(c)



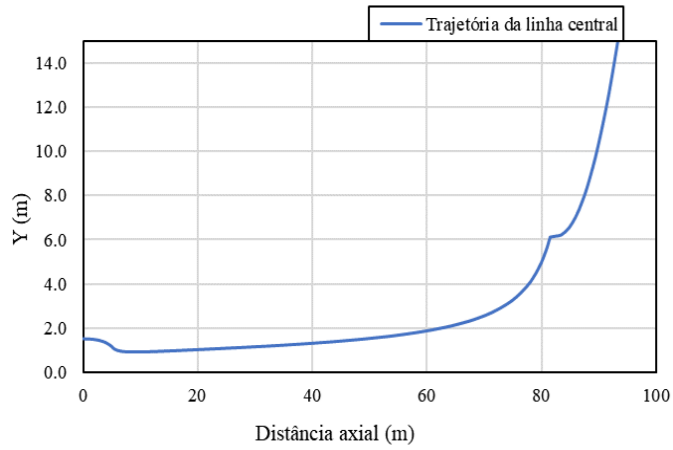
(d)



(e)

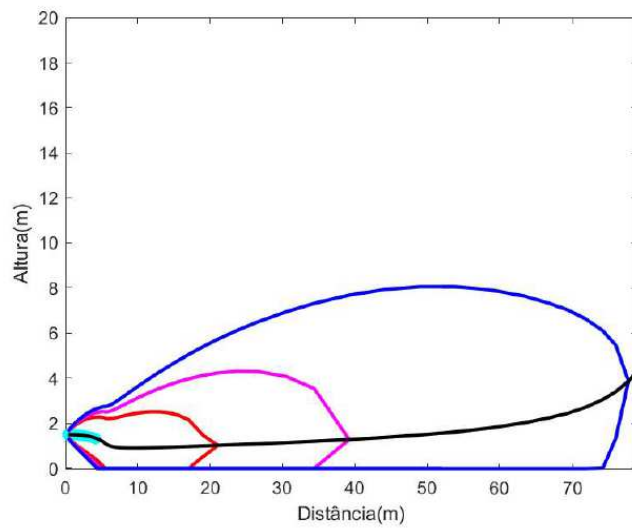


(f)

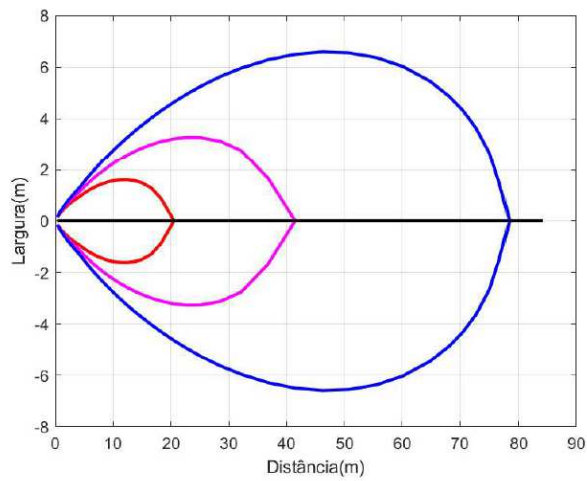


(g)

Figura C.12- Isolinhas para o caso 7: (a) pluma vertical (b) pluma lateral.



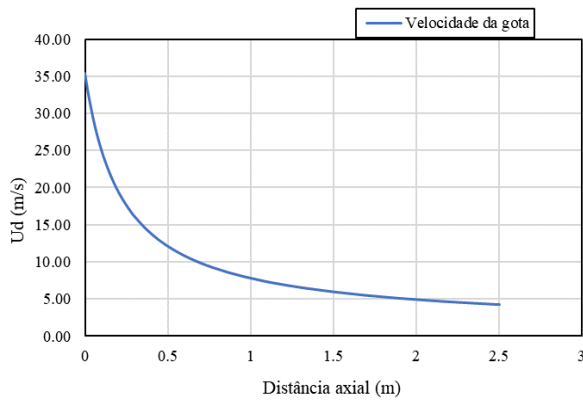
(a)



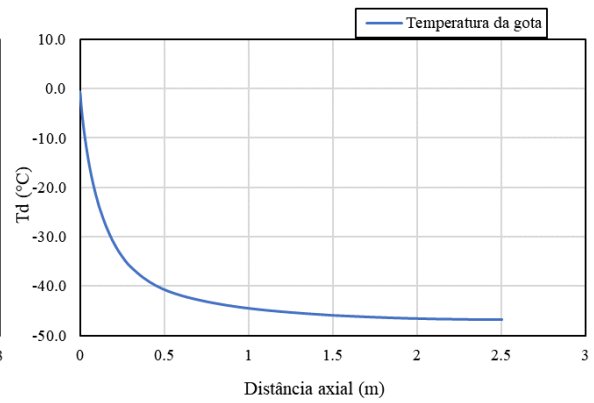
(b)

C.8 Caso 8 – Butano ($X = 1.74$)

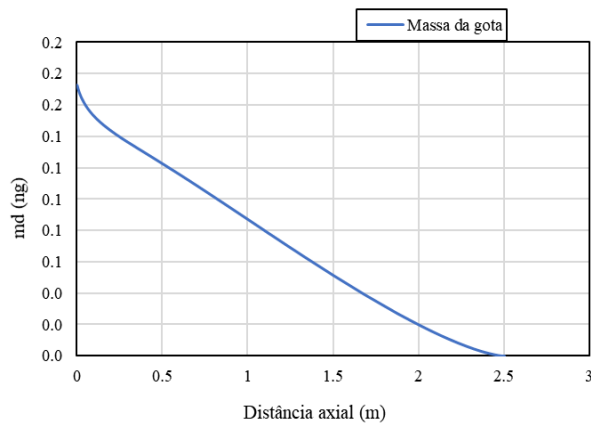
Figura C.13- Resultados para o caso 8: (a) velocidade da gota; (b) temperatura da gota; (c) massa da gota; (d) temperatura média do gás; (e) velocidade do gás na linha central; (f) concentração na linha central; (g) trajetória da linha central.



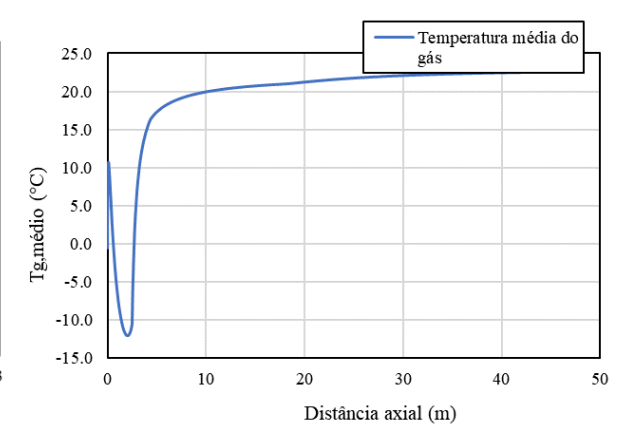
(a)



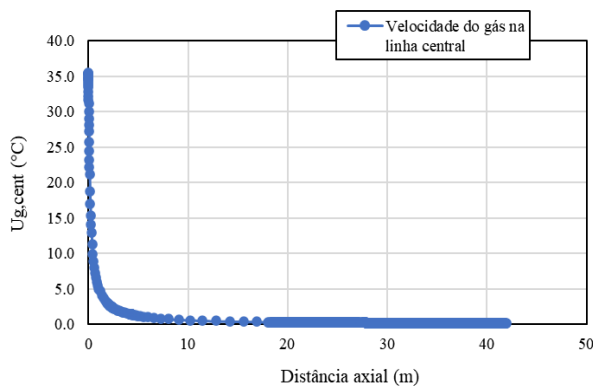
(b)



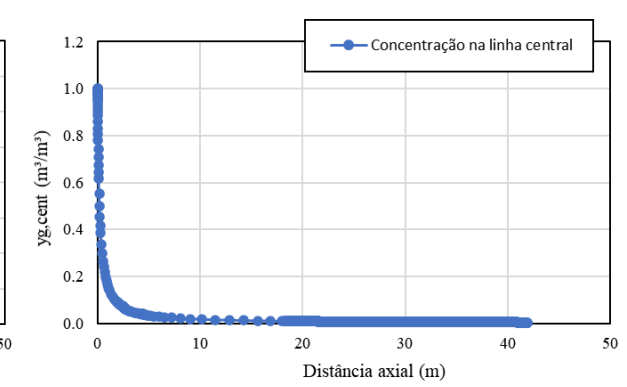
(c)



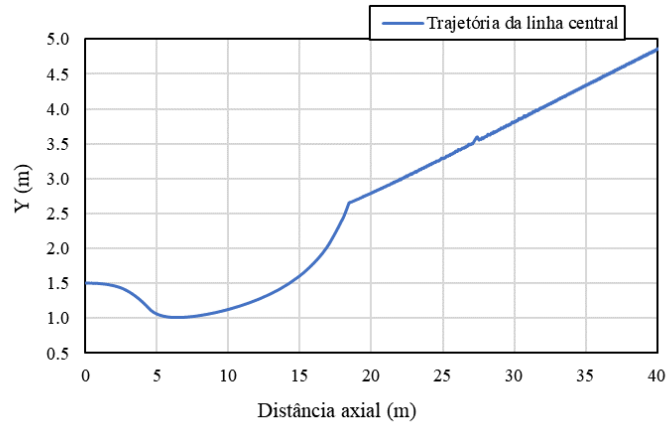
(d)



(e)

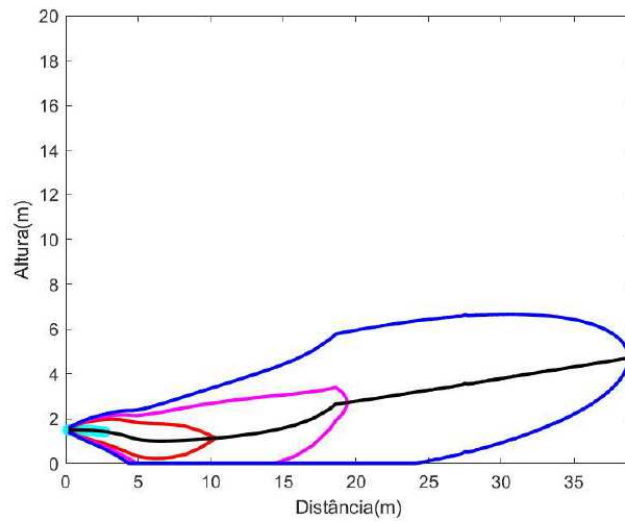


(f)

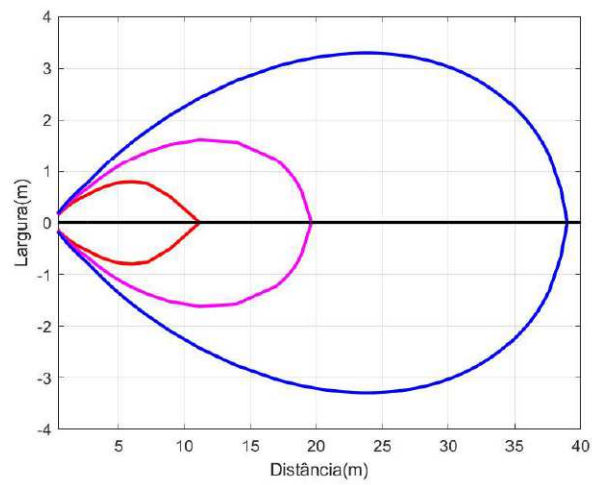


(g)

Figura C.14- Isolinhas para o caso 8: (a) pluma vertical (b) pluma lateral; (c) pluma lateral uniforme.



(a)



(b)

APÊNDICE D – Rotinas em ambiente MATLAB.

D.1 Rotina “parameters.m”

```

% Parâmetros para os cálculos das seguintes propriedades:

% Pronano      Butano      Pentano      Hexano      Heptano      Octano      Nonano      Decano      Água      Amônia      Propileno      Acetona      Carbon dioxide
% C3H8        C4H10        C5H12        C6H14        C7H16        C8H18        C9H20        C10H22      H2O
% Peso molecular(kg/mol)
WM = [0.0441    0.05812    0.0722    0.08618    0.1002    0.11423    0.1283    0.1423    0.01802    0.017031    0.04208    0.05808    0.04401];
% Limite mínimo de explosividade
LEL = [2.1      1.8      1.4      1.1      1.0      1.0      0.7      0.7      0.0      15      2.4      2.5      0 ];
% Temperatura crítica
Tc = [369.83    425.12    469.734    507.534    540.076    568.782    594.127    618.05    647.1081    405.65    364.85    508.15    304.21];
% Pressão crítica
Pc = [4256007.6  3796000    3367436    3027962.2    2735865.5    2486203.2    2293157.5    2103904.7    22076478.2    11280000    4600000    4701000    7383000];
% Fator acêntrico
acent = [0.15232    0.19949    0.25062    0.30044    0.34977    0.39758    0.44822    0.4856    0.34425    0.2526    0.1376    0.3065    0.2236];
% Densidade do Líquido (mol/dm³)
R1 = [1.3757    1.0677    0.84947    0.70824    0.61259    0.5266    0.46321    0.41084    -13.851    3.5383    1.4403    1.2332    2.768];
R2 = [0.27453    0.27188    0.26726    0.26411    0.26211    0.25693    0.25444    0.25175    0.64038    0.25443    0.26852    0.25886    0.26212];
R3 = [369.83    425.12    469.7    507.6    540.2    568.7    594.6    617.7    -0.00191    405.65    364.85    508.2    304.21];
R4 = [0.29359    0.28688    0.27789    0.27537    0.28141    0.28571    0.28571    0.28571    1.8211e-06    0.2888    0.28775    0.2913    0.2908];
R5 = [ 0      0      0      0      0      0      0      0      0      0      0      0      0 ];
% Calor Latente (J/kmol)
L1 = [29209000    36238000    45087000    43848000    50014000    55180000    60370000    66126000    52053000    31523000    25216000    42150000    21730000];
L2 = [0.78237    0.8337    0.95886    0.34057    0.38795    0.38467    0.38522    0.39797    0.3199    0.3914    0.33721    0.3397    0.382 ];
L3 = [-0.77319    -0.82274    -0.92384    0.063282    0      0      0      0      -0.212    -0.2289    -0.18399    0      -0.4339 ];
L4 = [0.39246    0.39613    0.39393    -0.017037    0      0      0      0      0.25795    0.2309    0.22377    0      0.42213];
L5 = [ 0      0      0      0      0      0      0      0      0      0      0      0      0 ];
% Capacidade calorífica do líquido (J/kmol.K)
Cp11 = [62.983    191030    159080    172120    61.26    224830    383080    278620    276370    61.289    114140    135600    -8304300];
Cp12 = [113630    -1675    -270.5    -183.78    314410    -186.63    -1139.8    -197.91    -2090.1    80925    -343.72    -177    104370];
Cp13 = [633.21    12.5    0.99537    0.88734    1824.6    0.9589    2.7101    1.0737    8.125    799.4    1.0905    0.2837    -433.33];
Cp14 = [-873.46    -0.03874    0      0      -2547.9    0      0      0      -0.014116    -2651    0      0.000689    0.60052];
Cp15 = [ 0      4.6121e-5    0      0      0      0      0      0      9.3701e-06    0      0      0      0 ];
% Capacidade calorífica do vapor(J/kmol.K)
Cpv1 = [51920    71340    88050    104400    120150    135540    151750    167200    33363    33427    43852    57040    29370];
Cpv2 = [192450    243000    301100    352300    400100    443100    491500    535300    26790    48980    150600    163200    34540];
Cpv3 = [1626.5    1630    1650.2    1694.6    1676.6    1635.6    1644.8    1614.1    2610.5    2036    1398.8    1607    1428];
Cpv4 = [116800    150330    189200    236900    274000    305400    347000    378200    8896    22560    74754    96800    26400];
Cpv5 = [723.6    730.42    747.6    761.6    756.4    746.4    749.6    742    1169    882    616.46    731.5    588 ];

```

Apêndice

```

% Pressão de vapor (Pa)
P1 = [ 59.078      66.343      78.741      104.65      87.829      96.084      109.35      112.73      73.649      90.483      43.905      69.006      140.54 ];
P2 = [-3492.6     -4363.2     -5420.3     -6995.5     -6996.4     -7900.2     -9030.4     -9749.6     -7258.2     -4669.7     -3097.8     -5599.6     -4735 ];
P3 = [-6.0669     -7.046      -8.8253     -12.702     -9.8802     -11.003     -12.882     -13.245     -7.3037     -11.607     -3.4425     -7.0985     -21.268 ];
P4 = [1.0919e-5   9.4509e-6   9.6171e-06  1.2381e-05  7.2099e-06  7.1802e-06  7.8544e-06  7.1266e-06  4.1653e-06  1.7194e-02  9.9989e-17  6.2237e-06  4.0909e-2];
P5 = [ 2          2          2          2          2          2          2          2          2          1          6          2          1 ];

% Viscosidade dinâmica do vapor (Pa.s)
v1= [4.9054e-08   3.4387e-08   6.3412e-08   1.7514e-07   6.672e-08   3.1191e-08   1.0344e-07   2.64e-08   1.7096e-08  4.1855e-08  7.3919e-07  3.1005e-08  2.148e-6];
v2= [0.90125     0.94604     0.84758     0.70737     0.82837     0.92925     0.77301     0.9487     1.1146     0.9806     0.5423     0.9762     0.46 ];
v3= [0           0           41.718      157.14      85.752      55.092      220.47      71          0          30.8        263.73     23.139     290 ];
v4= [0           0           0           0           0           0           0           0           0           0           0           0           0 ];

% Viscosidade dinâmica do líquido(Pa.s)
v11 = [-17.156     -7.2471     -53.509     -56.569     -9.4622     -7.556      -68.54      9.6489     -52.843     -6.743     -92.082     -14.918     18.775 ];
v12 = [646.25     534.82     1836.6      2140.5      877.07      881.09      3165.3     1181.1     3703.6     598.3     1907.3     1023.4     -402.92];
v13 = [1.1101     -0.57469    7.1409      7.5175      -0.23445    -0.52502     9.0919     -0.24367    5.866     -0.7341     15.639     0.5961     -4.6854];
v14 = [-7.3439e-11  -4.6625e-27 -1.9627e-05 -1.7676e-05  1.4022e22  4.6342e22  -1.3519e-5  9.0522e34  -5.879e-29  -3.69e-27  -0.043098  0          -6.9171e-26];
v15 = [ 4          10         2          2          -10         -10         2          -15         10         10         1          0          10 ];

% Condutividade térmica do vapor(W/m.K)
k1= [-1.12         0.051094     -684.4      -650.5      -0.070028  -8758      -0.065771  -668.4      6.2041e-06  9.6608e-06  0.0000449  -26.8      3.69 ];
k2= [0.10972     0.45253     0.764      0.8053      0.38068     0.8448     0.27198     0.9323     1.3973     1.3799     1.2018     0.9098     -0.3838 ];
k3= [-9834.6      5455.5      -105500000  -1412100000 -7049.9     -2.7121e10 -3482.3     -4.071e09  0          0          421        -126500000  964 ];
k4= [-7535800     1979800     0           0           -2400500    0          -1580300    0          0          0          0          0          1860000];

% Condutividade térmica do líquido(W/m.K)
k11= [0.26755     0.27349     0.2537      0.22492     0.215      0.2156     0.209      0.2063     -0.432     1.169      0.24719     0.2878     0.4406];
k12= [-0.00066457  -0.00071267  -0.000576  -0.0003533  -0.000303  -0.00029483 -0.000264  -0.00025  0.0057255  -0.002314  -0.00048824 -0.000427  -0.0012175];
k13= [2.774e-7     5.1555e-7  0.000000344  0          0          0          0          0          -0.000008078  0          0          0          0 ];
k14= [ 0           0           0           0           0           0          0          0          1.861e-9     0          0          0          0 ];
k15= [ 0           0           0           0           0           0          0          0          0          0          0          0          0 ];

% Tensão superficial do líquido (N/m)
os1 = [0.0506753901  0.0518198239  0.0521085155  0.0520941439  0.0520694989  0.0517975077  0.051568606  0.0511714913  0.224658208  0.112181293  0.0526168791  0.0707214359  0.0882923];
os2 = [1.22222222  1.22222222  1.22222222  1.22222222  1.22222222  1.22222222  1.22222222  1.22222222  1.22222222  1.22222222  1.22222222  1.22222223  1.22222];
os3 = [1.68102627e-09  5.4111705e-10  1.2033678e-10  -2.0030588e-09  2.0421919e-10  -1.407385e-13  1.97092356e-09  8.5140069e-11  -3.45018e-10  1.0613826e-12  1.6359086e-13  -28806921e-08  1.69392e-10];
os4 = [-1.8612364e-09  -6.010394e-10  -1.388647e-10  2.23911613e-09  -2.28755e-10  1.6803203e-13  -2.214348e-09  -9.606836e-11  3.78093e-10  -5.480229e-13  0          290249133e-08  -1.88425e-10];
os5 = [7.5035714e-10  2.4188317e-10  5.3781248e-11  -8.963747e-10  9.1292236e-11  0          8.7831458e-10  3.7877818e-11  -1.529228e-10  0          0          -11236124e-08  7.58394e-11];

```

D.2 Rotina “Propriedades.m”

```

parameters;
g = 9.81; % Aceleração da gravidade(m/s^2)
R = 8.314; % Constante dos gases (8.314 J/mol.K)
Wma = 0.02896; % Massa molar do ar(kg/mol)
Wmw = 0.01802; % Massa molar da água

Pvs = @ (T) exp (P1 (i) +(P2 (i) ./T) +P3 (i) .*log (T) +P4 (i) .* (T) .^P5 (i)); % Pressão de vapor
%Capacidade calorífica do líquido
if i==1 || i==5 || i==10 %Propane(i=1) and heptane(i=5)
Cpl = @ (T) (((Cpl1 (i) .^2) ./ (1 - (T ./ Tc (i)))) + Cpl2 (i) - 2 .* Cpl1 (i) .* Cpl3 (i) .* (1 - (T ./ Tc (i))) - Cpl1 (i) .* Cpl4 (i) .* ((1 - (T ./ Tc (i))) .^2) - ((Cpl3 (i) .^2) .* ((1 - (T ./ Tc (i))) .^3)) ./ 3 - (Cpl3 (i) .* Cpl4 (i) .* ((1 - (T ./ Tc (i))) .^4)) ./ 2 - ((Cpl4 (i) .^2) .* ((1 - (T ./ Tc (i))) .^5)) ./ 5) ./ (Wm (i) .* 1000);
else
Cpl = @ (T) (Cpl1 (i) + Cpl2 (i) .* T + Cpl3 (i) .* (T .^2) + Cpl4 (i) .* T .^3 + Cpl5 (i) .* T .^4) ./ (Wm (i) .* 1000);
end
Cpv = @ (T) (Cpv1 (i) + Cpv2 (i) .* ((Cpv3 (i) ./ T) / sinh (Cpv3 (i) ./ T) .^2) + Cpv4 (i) .* ((Cpv5 (i) ./ T) ./ cosh (Cpv5 (i) ./ T) .^2)) ./ (1000 .* Wm (i)); %Capacidade calorífica do vapor (J/kg)
Lv = @ (T) (L1 (i) .* ((1 - (T ./ Tc (i))) .^ (L2 (i) + L3 (i) .* (T ./ Tc (i))) + L4 (i) .* (T ./ Tc (i)) .^2) + L5 (i) .* (T ./ Tc (i)) .^3)) ./ (Wm (i) .* 1000); %Calor de vaporização (J/kg)
if i==9 %Water
rol = @ (T) (17.863 + 58.606 .* ((1 - (T ./ 647.096)) .^0.35) - 95.396 .* ((1 - (T ./ 647.096)) .^ (2/3)) + 213.89 .* (1 - (T ./ 647.096)) - 141.16 .* ((1 - (T ./ 647.096)) .^ (4/3))) .* Wm (i) .* 1000; % Densidade do líquido(kg/m^3)
else
rol = @ (T) (R1 (i) ./ R2 (i) .^ (1 + (1 - T ./ R3 (i)) .^ R4 (i))) .* Wm (i) .* 1000;
end
rov = @ (P, T) (P .* Wm (i)) ./ (R .* T); % Densidade do vapor(kg/m^3)
v1 = @ (T) exp (v11 (i) + v12 (i) ./ T + v13 (i) .* log (T) + v14 (i) .* (T .^ (v15 (i)))); % Viscosidade dinâmica do líquido(N.s/m^2)
vv = @ (T) (v1 (i) .* (T .^ v2 (i))) ./ (1 + (v3 (i) ./ T) + (v4 (i) ./ (T .^2))); % Viscosidade dinâmica do vapor (N.s/m^2)
os = @ (T) os1 (i) .* ((1 - (T ./ Tc (i))) .^ (os2 (i) + os3 (i) .* (T ./ Tc (i))) + os4 (i) .* (T ./ Tc (i)) .^2) + os5 (i) .* (T ./ Tc (i)) .^3); % Tensão superficial do líquido(N/m)
kv = @ (T) (k1 (i) .* (T .^ k2 (i))) ./ (1 + (k3 (i) ./ T) + (k4 (i) ./ (T .^2))); % Condutividade térmica do vapor (W/m.K)
kl = @ (T) (k11 (i) + k12 (i) .* T + k13 (i) .* (T .^2) + k14 (i) .* (T .^3) + k15 (i) .* (T .^4)); % Condutividade térmica do líquido (W/m.K)
%-----Propriedades do ar-----
Cpva1 = 28958; Cpva2 = 9390; Cpva3 = 3012; Cpva4 = 7580; Cpva5 = 1484;
Cpva = @ (T) (Cpva1 + Cpva2 .* ((Cpva3 ./ T) / sinh (Cpva3 ./ T) .^2) + Cpva4 .* ((Cpva5 ./ T) ./ cosh (Cpva5 ./ T) .^2)) ./ (1000 .* Wma); % Capacidade calorífica do vapor
Va = 1.425e-6; Vb = 0.5039; Vc = 108.3; Vd = 0;
va = @ (T) (Va .* (T .^ Vb)) ./ (1 + (Vc ./ T) + (Vd ./ (T .^2))); % Viscosidade do ar
roa = @ (P, T) (P .* Wma) ./ (R .* T);
kla = 0.00031417; k2a = 0.7786; k3a = -0.7116; k4a = 2121.7;
kar = @ (T) (kla .* (T .^ k2a)) ./ (1 + (k3a ./ T) + (k4a ./ (T .^2))); % Condutividade térmica do ar
Pal = 21.662; Pa2 = -692.39; Pa3 = -0.392; Pa4 = 4.7574e-3; Pa5 = 1;
Pva = @ (T) exp (Pal + (Pa2 / T) + Pa3 * log (T) + Pa4 * (T ^ Pa5));

%-----Propriedades do vapor de água-----
Plwv = 73.649; P2wv = -7258.2; P3wv = -7.3037; P4wv = 4.1653e-06; P5wv = 2;
Pwv = @ (T) exp (Plwv + (P2wv / T) + P3wv * log (T) + P4wv * (T ^ P5wv));
rowv = @ (P, T) (P .* 0.01802) ./ (R .* T);
rowl = @ (T) (17.863 + 58.606 .* ((1 - (T ./ 647.096)) .^0.35) - 95.396 .* ((1 - (T ./ 647.096)) .^ (2/3)) + 213.89 .* (1 - (T ./ 647.096)) - 141.16 .* ((1 - (T ./ 647.096)) .^ (4/3))) .* 0.01802 .* 1000;
Cpww1 = 33363; Cpww2 = 26790; Cpww3 = 2610.5; Cpww4 = 8896; Cpww5 = 1169;
Cpww = @ (T) (Cpww1 + Cpww2 .* ((Cpww3 ./ T) / sinh (Cpww3 ./ T) .^2) + Cpww4 .* ((Cpww5 ./ T) ./ cosh (Cpww5 ./ T) .^2)) ./ (1000 .* 0.01802);
Cpwl1 = 276370; Cpwl2 = -2090.1; Cpwl3 = 8.125; Cpwl4 = -0.014116; Cpwl5 = 9.3701e-06;
Cpwl = @ (T) (Cpwl1 + Cpwl2 .* T + Cpwl3 .* (T .^2) + Cpwl4 .* T .^3 + Cpwl5 .* T .^4) ./ (Wmw .* 1000);
Lwv1 = 52053000; Lwv2 = 0.3199; Lwv3 = -0.212; Lwv4 = 0.25795; Lwv5 = 0;
Lwv = @ (T) (Lwv1 .* ((1 - (T ./ 647.1081)) .^ (Lwv2 + Lwv3 .* (T ./ 647.1081) + Lwv4 .* ((T ./ 647.1081) .^2) + Lwv5 .* ((T ./ 647.1081) .^3))) ./ (0.01802 .* 1000);
v1w1 = -52.843; v1w2 = 3703.6; v1w3 = 5.866; v1w4 = -5.879e-29; v1w5 = 10;
v1w = @ (T) exp (v1w1 + v1w2 / T + v1w3 * log (T) + v1w4 * (T .^ (v1w5)));
osw1 = 0.224658208; osw2 = 1.22222222; osw3 = -3.45018e-10; osw4 = 3.78093e-10; osw5 = -1.529228e-10;
osw = @ (T) osw1 * ((1 - (T ./ 647.1081)) .^ (osw2 + osw3 .* (T ./ 647.1081) + osw4 .* (T ./ 647.1081) .^2) + osw5 .* (T ./ 647.1081) .^3));

```

D.3 Rotina "Input.m"

```

clc;
%-----
%                               Two Phase Release
%-----
% parameters;
% Propriedades;
%-----
% Input data
%-----

Componente = ("Propane");

if Componente == ("Propane")
    i=1;
elseif Componente == ("Butane")
    i=2;
elseif Componente == ("Pentane")
    i=3;
elseif Componente == ("Hexane")
    i=4;
elseif Componente == ("Heptane")
    i=5;
elseif Componente == ("Octane")
    i=6;
elseif Componente == ("Nonane")
    i=7;
elseif Componente == ("Decane")
    i=8;
elseif Componente == ("Water")
    i=9;
elseif Componente == ("Ammonia")
    i=10;
elseif Componente == ("Propylene")
    i=11;
elseif Componente == ("Acetone")
    i=12;
elseif Componente == ("Carbon dioxide")
    i=13;
end
parameters;
Propriedades;
%i=10 --> Ar

%-----
Cds = 15;           %Discharge coefficient - Constant related to droplet
                   %size (-) 10 <= Cds <= 20
%
g = 9.81;           % Acceleration of gravity(m/s²)
R = 8.314;          % Gas constant (8.314 J/mol.K)
Wma = 0.02896;     % Air molecular mass(kg/mol)
Cd = 1;             % Coeficiente de descarga
% Cd=0.62;
% %-----

epsilon = 0;        % Para atmosfera estável
Ta = 24+273.15;     % Temperatura ambiente(K)
Pa = 101325;        % Pressão ambiente(Pa ou N/m²)
uw = 1;             % Velocidade do vento
RH = 0;             % Umidade relativa
Tref=Ta;            % Temperatura de referência para utilizar no balanço de energia
T0=300;
Tb = fzero(@P_Vapor,T0,[],Pa,i); % Temperatura de bolha (K)

```

```

%-----
% Condições na saída
%-----
phims = 0; % Fração de vapor no armazenamento
hs = 1.5; % Altura da fonte(m)
de=10e-3; % Diâmetro do orifício (m)
Ae=pi()*(de/2)^2; % Área do orifício(m²)
L=de/10; % Comprimento do tubo ou espessura do vaso
% (para aplicação do modelo Phast para o
% cálculo do SMD.

% Quando somente a Temperatura de armazenamento é fornecida:
Ts=Ta; % Temperatura de armazenamento (K)
Ps=1.03*Pvs(Ts); % Pressão de armazenamento para caso de equilíbrio (Pa)

% Quando somente a Pressão de armazenamento é fornecida:
% Ps=500000; % Pressão de armazenamento(Pa)
% Ts = fzero(@P_Vapor,T0,[],Ps,i); % Temperatura de armazenamento para caso de equilíbrio (Pa)

Psat=Pvs(Ts); % Pressão de saturação em Ts (Pa)
%-----
% Cálculo da pressão e temperatura no orifício
%-----
%Propriedades nas condições de armazenamento
rosl=rol(Ts); %Densidade da fase líquida (kg/m³)
rosv = (Ps*WM(i))/(R*Ts); %Densidade da fase vapor (kg/m³)
ros = 1/(((1-phims)/rosl) + (phims/rosv)); %Densidade média(kg/m³)
%
%Volumes específicos
vls = 1/rosl; %líquido
vvs = 1/rosv; %vapor
vos = 1/ros; %médio
vlv = -vls+vvs; %diferença entre líquido e vapor

if Ps==Psat % Fluido saturado
disp('Saturated Liquid')
omega = phims*(vlv/vos)+((Cpl(Ts)*Ts*Ps)/vos)*((vlv/Lv(Ts))^2); % Omega na pressão de saturação
ene0=1;
ene = fzero(@enecritical,ene0,[],omega);
Pe=ene*Ps;
if Pe<Pa %Unchoked
disp('Subcritical flow')
Pe=Pa; % Pressão no orifício (Pa)
Te =Ts; % Temperatura no orifício (K)
qsel= Cd*Ae*sqrt(Ps*rosl)*(sqrt(-2*(omega*log(Pa/Ps)+(omega-1)*(1-(Pa/Ps)))))/(omega*((Ps/Pa)-1)+1);
elseif Pe>Pa %choked
disp('Critical flow')
Pe = ene*Ps; % Pressão no orifício (Pa)
Te =fzero(@P_Vapor,T0,[],Pe,i); % Temperatura no orifício (K)
qsel = 1*Ae*sqrt(Ps*rosl)*(ene/sqrt(omega));
end
else
if Ps>Psat % Líquido subresfriado
disp('Subcooled Liquid')
% Líquido subresfriado (Leung Method)
omegas = phims*(vlv/vos)+((Cpl(Ts)*Ts*Pvs(Ts))/vos)*((vlv/Lv(Ts))^2); % Omega na pressão de saturação
enes = Pvs(Ts)/Ps; % inverso da razão de subresfriamento
enesc=(2*omegas)/(1+2*omegas); % valor crítico que separa baixo de alto subresfriamento
erro=enes/enesc;
if enes >= enesc
disp('Low subcooling') % Fluido flasheia antes do orifício
enec = fzero(@enecriticalallow,1,[],omegas,enes);
Pe = enec*Ps; % Pressão crítica para baixo subresfriamento
if Pe<Pa % Unchoked flow (subcritical)
disp('Subcritical flow')
enec=Pa/Ps;
Pe=Pa; % Pressão no orifício (Pa)
Te =Ts; % Temperatura no orifício (K)
else

```

```

disp('Critical flow')
eneq=enec; % Choked flow (critical)
Pe = enec*Ps; % Pressão no orifício (Pa)
Te = fzero(@P_Vapor,T0,[],Pe,i); % Temperatura no orifício (K)
end
% vazão crítica para baixo subresfriamento
qsel = (Ae*sqrt(Ps*ros1)*sqrt(2*(1-enes)+2*(omegas*enes*log(enes/enec)-(omegas-1)*(enes-enec)))/(omegas*((enes/enec)-1)+1);
else
disp('Hight subcooling')
if Pvs(Ts) < Pa % Subcrítico
disp('Subcritical flow')
Pe=Pa; % Pressão no orifício (Pa)
Te=Ts; % Temperatura no orifício (K)
else % Crítico
disp('Critical flow')
Pe=Pvs(Ts); % Pressão no orifício (Pa)
Te =Ts; % Temperatura no orifício (K)
end
qsel = Cd*Ae*sqrt(2*ros1*(Ps-Pe));
end
end
end

```

D.4 Rotina “enecritical.m”

```

function F = enecritical(y,omega)

ene = y(1);

F = ene^2 + ((omega^2)-2*omega) * ((1-ene)^2)+2*(omega^2)*log(ene)+2*(omega^2)*(1-ene);

end

```

D.5 Rotina “enecriticallow.m”

```

function F = enecriticallow(y,omegas,enes)

enec = y(1);

F = ((omegas+(1/omegas)-2)/(2*enes))*(enec^2)-2*(omegas-1)*enec+omegas*enes*log(enec/enes)+1.5*omegas*enes-1;

end

```

D.6 Rotina “P_Vapor.m”

```

function F = P_Vapor(x,P,i)

parameters;

T = x(1);

F = -P + exp(P1(i)+P2(i)/T+P3(i)*log(T)+P4(i)*(T^P5(i)));

end

```


D.7 Rotina Principal “Jet.m”

```

%-----
%                               Cálculo inicial - Bifásico
%-----
clear all
clc;
Input;           %Dados de entrada

%-----
%                               Cálculo no Ponto de Liberação
%-----

phime =(integral(Cpl,Tref,Ts)-integral(Cpl,Tref,Te)+phims*Lv(Ts))/(Lv(Te));
roel=rol(Te);           %Densidade do líquido (kg/m³)
roev = (Pe*WM(i))/(R*Te);           %Densidade do vapor (kg/m³)
roe = 1/(((1-phime)/roel) + (phime/roev));           %Densidade total no orifício(kg/m³)

if phime==0
qse =Cd*Ae*sqrt(2*rosl*(Ps-Pe));           %Para vazamento de líquido no orifício
ue=sqrt(2*(Ps-Pe)/rosl);
uel = qse/(roe*Ae);
else
qse =Cd*Ae*sqrt(2*roe*(Ps-Pe));           %Para vazamento bifásico
ue = qse/(Cd*roe*Ae);
end

vle=vl(Te);           %Viscosidade do líquido
vve=vv(Te);           %Viscosidade da fase vapor
ogvve = ((1+sqrt(vle/vve)*((WM(i)/WM(i))^(1/4)))^2)/(sqrt(8)*sqrt((1+(WM(i)/WM(i)))));
ogvve = ((1+sqrt(vve/vle)*((WM(i)/WM(i))^(1/4)))^2)/(sqrt(8)*sqrt(1+(WM(i)/WM(i))));
vm = (phime*vve)/(phime+(1-phime)*ogvve) +((1-phime)*vle)/(phime*ogvve+(1-phime));           %Viscosidade da mistura de gás no filme
Ree = (de*ue)/vm;           %Número de Reynolds
roamb=roa(Pa,Ta);           %Densidade do ar

%-----
%                               Cálculo das Condições Pós Expansão
%-----
uf = ((Pe-Pa)*Ae)/(qse) + ue;           %Velocidade do jato após a expansão (m/s)
phimf=1-((integral(Cpv,Tref,Tb)-integral(Cpv,Tref,Te)+(1-phime)*Lv(Te)+0.5*(uf^2-ue^2))/Lv(Tb));           %Fração de vapor após a expansão

%Se nesse ponto for líquido(phimf=0) ou vapor(phimf=1), a temperatura Tf deve
%ser calculada
% phimf=0;
% Tf = fzero(@T_f,T0,[],Tref,Te,phime,phimf,ue,uf,i);

if phimf<0
    phimf=0;
end
if phimf>1
    phimf=1;
end
rofl =rol(Tb);
rofv = rov(Pa,Tb);
rof = 1/(((1-phimf)/rofl) + (phimf/rofv));           %Densidade média pós expansão (kg/m³)
Af = (qse)/(rof*uf);           %Área da seção transversal(m²)
qsf =rof*Af*uf;
bf = sqrt(Af/pi());           %Raio expandido (m)
df = 2*bf;

%-----
%                               Cálculo do Diâmetro da Gota
%-----
osg=os(Tb);           %Tensão superficial do vapor
vlf=vl(Tb);           %Viscosidade do líquido
Ref = (2*bf*uf)/vlf;           %Número de Reynolds
Wef = (2*bf*(uf^2)*rofl)/osg;           %Número de Weber

% Modelo recomendado pelo Yellow Book (m)
%-----
if Wef < ((Ref^(-0.45))*10e6) && Te < (1.11*Tb)
    d0 = 3.78.*bf.*sqrt(1+(3*(sqrt(Wef))./Ref));
else
    d0 = 15.*(osg./((uf^2).*roamb));
end

% Modelo de Tilton e Farley
%-----
dd3 = 0.585*(1/uf)*sqrt(osg/rofl);

[dd2] = phast_diameter(Te,Pe,Ta,Tb,Pa,ue,de,L,l,i);           %Modelo Phast JIPIII
[ddl] = CCPS_diameter(Tb,Ts,Ta,Pa,Pe,uf,ue,phimf,rofl,rofv,i);           %Modelo CCPS

dd=ddl;           % Diâmetro médio da gota (SMD)

```

Apêndice

```

% Ajuste do coeficiente de arraste
%-----
if phime ==0
alfa = abs(0.5506-(0.00007*Ree));
else
alfa=0.0806;
end

%Valores iniciais para solução das equações diferenciais
%na região bifásica

ql0=(1-phimf)*qsf; % Vazão inicial de líquido
qar0 = 0; % Vazão inicial de ar
qw0=0; % Vazão inicial de vapor de água
teta0=0; % Ângulo inicial
Py0 = (pi()*(bf^2)*rof*(uf^2))*sin(teta0); % Momento inicial do jato bifásico em y
Px0=(pi()*(bf^2)*rof*(uf^2))*cos(teta0); % Momento inicial do jato bifásico em x
xv0 =(5*bf)*sqrt(rof/roamb); % Posição axial inicial (virtual origin)
h0 = hs; % Posição vertical inicial ( e altura inicial da agota)
Xjet0 = xv0; % Posição inicial do jato bifásico
Yjet0=h0; % Altura inicial do jato bifásico
udy0=uf*sin(teta0); % Velocidade inicial da gota (componente y)
udx0=uf*cos(teta0); % Velocidade inicial da gota (componente x)
Xx0 = xv0; % Posição inicial da gota
md0=rofl*( (4/3)*pi()*(dd/2)^3); % Massa inicial da gota
Nd0=ql0/md0; % Número inicial de gotas
Td0=Tb; % Temperatura inicial da gota
qlc0=ql0; % Vazão inicial de líquido
qvc0=qsf-ql0; % Vazão inicial de vapor
Tg0=Tb; % Temperatura inicial do gás e da gota

CT = [0 5];
CI = [qar0 Py0 Px0 Xjet0 Yjet0 udy0 h0 Xx0 md0 Td0 qw0 qsf qvc0 Tb];
abstol=1e-10*ones(1,length(CI)); abstol(9)=1e-15;
options = odeset('Events',@myevents,'AbsTol',abstol,'RelTol',1e-3);
[s,w] =ode23t(@ftwo3,CT,CI,options,g,R,WM,Pa,Ta,uw,Tb,qsf,WMa,ql0,dd,phimf,Tref,epsilon,RH,uf,Af,md0,rof,df,xv0,i);
spp = s(sum(w==real(w),2)==size(w,2),:); % getting rid of complex values
z = w(sum(w==real(w),2)==size(w,2),:); % getting rid of complex values
qarr = z(:,1);
Pyy=z(:,2);
Pxx=z(:,3);
Xjett = z(:,4);
Yjett = z(:,5);
udyy = z(:,6);
hh=z(:,7);
Xxx =z(:,8);
mdd=z(:,9);
Tdd = z(:,10);
qww = z(:,11);
qjett=z(:,12);
qvcc=z(:,13);
Tgr=z(:,14);

% No caso de ocorrer Rainout
del=-0.047;
sp = spp(hh>=del,1);
qar=qarr(hh>=del,1);
Py=Pyy(hh>=del,1);
Pxx=Pxx(hh>=del,1);
Xjet = Xjett(hh>=del,1);
Yjet = Yjett(hh>=del,1);
udy = udyy(hh>=del,1);
h=hh(hh>=del,1);
Xx =Xxx(hh>=del,1);
md = mdd(hh>=del,1);
Td = Tdd(hh>=del,1);
qw = qww(hh>=del,1);
qjet = qjett(hh>=del,1);
qvc = qvcc(hh>=del,1);
Tg =Tgr(hh>=del,1);

```

Apêndice

```

if length(h)< length (hh)
    disp('Rain out')
end

for w=1:length(Xx)
    if qw(w)<0 ||qw(w)<1e-13
        qw(w)=0;
    end
end

Dd=(md./rol(Td)).*(6./pi()).^(1./3); %Variação do diâmetro da gota
ywmol=(RH/100).*(Pwv(Ta)./Pa); %Fração molar de vapor de água no ar
WMha = (1-ywmol).*WMa+ywmol.*0.01802; %Massa molar do ar úmido
zeta=(ywmol.*(0.01802./WMha))./(1-(ywmol.*(0.01802./WMha)));
qlc=qsf-qvc;

phil=qlc./qjet; %Fração mássica de líquido
phiv=qvc./qjet; %Fração mássica de vapor
phia=qar./qjet; %Fração mássica de ar
phiw=qw./qjet; %Fração mássica de vapor de água
yw=( phiw.*(1./0.01802))./( phil.*(1./WM(i))+phiv.*(1./WM(i))+ phia.*(1./WMA)+phiw.*(1./0.01802)); %Fração molar de vapor de água

ywmass=zeros(length(Xjet),1);
yl=zeros(length(Xjet),1);
qwvv=zeros(length(Xjet),1);
qwll=zeros(length(Xjet),1);
ywmol=zeros(length(Xjet),1);
Raz=zeros(length(Xjet),1);
for w=1:length(Xjet)
    Raz(w)=(Pwv(Tg(w))./Pa);
    if yw(w) < Raz(w)
        qwvv(w)=qw(w);
        qwll(w)=0;
    else
        yl(w)=( phil(w)*(1./WM(li)))/( phil(w)*(1./WM(i))+phiv(w)*(1./WM(i))+ phia(w)*(1./WMA)+phiw(w)*(1./0.01802));
        ywmol(w)=( (1-ywmol(w)-yl(w))*(Pwv(Tg(w))./Pa))/(1-(Pwv(Tg(w))./Pa));
        ywmass(w) = ((ywmol(w))./(ywmol(w)+(1-ywmol(w))*(WMA/WM(i))));
        qwvv(w)=qw(w).*ywmass(w);
        qwll(w)=qw(w)-qwvv(w);
    end
end

qwll=qwll;
qwv=qwvv;

Nd=q10/md0; %Número de gotas
phimg=((qar+qvc+qwv)./qjet); %Fração de gás no jato
yg=(qvc./(qvc+qar+qwv)); %Fração de vapor do componente em relação ao gás
yvw=(qwv./(qvc+qar+qwv));
roamb = roa(Pa,Ta); %Densidade do ar no ambiente
roajet=roa(Pa,Tg); %Densidade do ar no jato bifásico
rolcjet = rol(Td); %Densidade do líquido no jato
rowljet = rowl(Tg); %Densidade da água líquida no jato
rowvjet =rowv(Pa,Tg); %Densidade do vapor de água no jato
rovjet = rov(Pa,Tg); %Densidade do vapor do componente
rog=1./(((1-yg-yvw)./roajet)+(yg./rovjet)+(yvw./rowvjet)); %Densidade do gás no jato
xl=qlc./(qlc+qwll); %Fração do componente líquido
xwl=qwll./(qlc+qwll); %Fração de água líquida
roljet = 1./((xl./rolcjet)+(xwl./rowljet)); %Densidade total do líquido
rojet = 1./(((1-phimg)./roljet)+(phimg./rog)); %Densidade total do jato

qM=sqrt(Px.^2+Py.^2); %Momento do jato bifásico
ujet=qM./qjet; %Velocidade do jato bifásico
Ajet=qM./((ujet.^2).*rojet); %Área do jato
Rjet=sqrt(Ajet./pi()); %Raio
sinteta=(Py./pi()).*(Rjet.^2).*rojet.*(ujet.^2));
teta= asin(sinteta); %Ângulo de inclinação do jato(em radianos)
Vg = (qvc+qar+qwv)./rog; %Volume de gás por segundo
Vd = ((4.*pi()).*(Dd./2).^3)./3).*Nd; %Volume ocupado pelas gotas por segundo
Kg = Vg./(Vg+Vd); %Fração que o gás ocupa no jato
ugas=(qvc+qar+qwv)./(rog.*Kg.*Ajet); %Velocidade da fase gás
cjmol=(yg.*(1/WM(i)))/(yg.*(1/WM(i))+(1-yg-yvw).*(1/WMA)+yvw.*(1/WMw));
ycomp = (yg.*(1./rovjet))./(yg.*(1./rovjet)+(1-yg-yvw).*(1./roajet)+yvw.*(1./rowvjet)); %Fração de vapor do componente em relação ao gás(volumétrica)

Ccomp = (qlc+qvc)./(ujet.*Ajet); %Concentração total do componente (kg/m³)
udx=ujet.*cos(teta); %Velocidade axial da gota
udy=sqrt(abs(udy).^2+udx.^2); %Velocidade relativa da gota

```

```

% Cálculo das constantes de decaimento (Região Bifásica)
Tcc=1/((sqrt(rof./roamb)).*(df./xv0));
Ccu=Tcc;
Ccc=Tcc;
% Variáveis na linha central
Tcent=((Tb-Td).*(Tcc.*sqrt(rof./roamb).*(df./((Xjet)))))+Td; %Temperatura
%Modelo de Long
Ccentlong=1.*Ccc.*(df./((Xjet))).*sqrt(rof./roamb); %Concentração volumétrica
Ccentmaslong=(Ccentlong.*rofv)./(Ccentlong.*rofv+(1-Ccentlong).*roamb); %Concentração mássica
ccentmolmaxlong=(Ccentmaslong.*(1/WM(d)))./(Ccentmaslong.*(1/WM(d))+(1-Ccentmaslong).*(1/WMa)); %Concentração molar
Ugcentlong=(uf).*Ccu.*(df./((Xjet))).*sqrt(rof./roamb); %Velocidade

resulttp = [qse ue phime uf phimf d0 dd3 dd2 ddl];
resultp = [Xx Xx-xv0 h Dd Dd*1e6 md md*1e9 ud Td Td-273.15 Tg Tg-273.15 ugas Tcent Tcent-273.15 Ugcentlong ccentmolmaxlong Yjet Xjet Xjet-xv0];
% Avaliação da taxa de evaporação das gotas
% [dmddt]=drop(Td,Te,Tg,Tb,Tcent,Pa,xog,udy,ugas,teta,Dd,ud,yg,sp,1);
% dmddtplot=-dmddt(1:length(sp),1);

figure(1)
subplot(2,2,1),plot(Xx,Dd),grid,xlabel('Distance (m)'),ylabel('Diameter (m)')
subplot(2,2,2), plot(Xx,h),grid,xlabel('Distance (m)'),ylabel('height (m)')
subplot(2,2,3), plot(Xx,md),grid,xlabel('Distance (m)'), ylabel('md (kg)')
subplot(2,2,4), plot(Xx,ud),grid,xlabel('Distance (m)'), ylabel('ud (m/s)')

figure(2)
subplot(2,1,1),plot(Xx,Tg),grid,xlabel('Distance (m)'),ylabel('Gas Temperature (K)')
subplot(2,1,2),plot(Xx,Td),grid,xlabel('Distance (m)'), ylabel('Td (K)')

figure(3)
subplot(3,1,1),plot(Xx,ujet),grid,xlabel('Distance (m)'),ylabel('Jet Velocity (m/s)')
subplot(3,1,2),plot(Xx,ycomp),grid,xlabel('Distance (m)'),ylabel('Volumetric fraction')
subplot(3,1,3),plot(Xjet,Yjet),grid,xlabel('Xjet (m)'), ylabel('Yjet (m)')

figure(4)
subplot(2,2,1),plot(Xjet,Ccentlong),grid,xlabel('Raio (m)'),ylabel('Centerline concentration')
subplot(2,2,2), plot(Xjet,Ugcentlong),grid,xlabel('Raio (m)'),ylabel('Centerline velocity')
% figure(5)
% subplot(2,1,2),plot(Xx, dmddtplot.*1e9),grid,xlabel('Distance (m)'),ylabel('Vaporization Rate (kg/s)')

figure(6)
subplot(2,1,1),plot(Xx,Tcent),grid,xlabel('Distance (m)'),ylabel('Centerline Temperature (K)')
subplot(2,1,2),plot(Xx,Tg-273.15),grid,xlabel('Distance (m)'),ylabel('Gas Temperature (K)')

%-----
% Values of the airborne mass flow rate vapour mass fraction, jet area
% and jet radius corrected for rain-out
%-----
qd=qse-(phimf*qse + (1 - phimf).*(1 - (Dd(end)./dd).^3).*qse); %Quantidade de líquido que chove

if Dd(end) > 0 && h(end)<=1e-6

%Droplet diameter at ground level
%-----
d0 = Dd(end);

% Nett mass released to the air by the jet (kg/s)
%-----
qsnettair = phimf*qse + (1 - phimf)*(1 - (d0/dd)^3)*qse;

phirainout = phimf/(phimf+(1-phimf)*(1-(d0/dd)^3)); % Quality

Afrainout = Af*qsnettair/qse; % Jet cross-section(m²)

bfrainout = sqrt(Afrainout/pi);% Jet radius (m)

phimf = phirainout;

Af = Afrainout;

end

% Exibição de resultados
%-----
disp('Vapour mass fraction at the exit ='); disp(phime);
disp('Vapour mass fraction after flashing ='); disp(phimf);
disp(' Mass flow rate(kg/s)='); disp(qse);
disp('Jet velocity in exit(m/s) ='); disp(ue);
disp('Jet velocity after flashing(m/s) ='); disp(uf);

```

```

%-----
%                               Região Monofásica
%-----
%Valores de entrada
qarg0=qar(end);
Pyg0=Py(end);
Prg0=Pr(end);
Pzg0=0;
Xgm0 =Xjet(end);
Ygm0 = Yjet(end);
qwg0= qw(end);
Zgm0=0; %linha central
Le1=(LEL(i)/100);
qarj=qar(end);
Tjet=(Tg(end));
Rj=Rjet(end);
qvqg=qvc(end);

CTi = [0 45];
Cii= [qarg0 qwg0 qjet(end) Pyg0 Prg0 Pzg0 Xgm0 Ygm0 Zgm0 Tjet];
abstol=1e-5*ones(1,length(Cii));
options = odeset('AbsTol',abstol,'RelTol',1e-3);
[sg,x] =ode23t(@gaadisp2,CTi,Cii,options,Ta,Pa,uw,qvqg,phimf,Tb,Tref,qsf,epsilon,RH,rojet(end),qarj,qjet(end),Rjet(end),Xjet(end),alfa,i);
qarg=x(:,1);
qwg=x(:,2);
qjetg=x(:,3);
Pyg = x(:,4);
Prg = x(:,5);
Pzg = x(:,6);
Xgm =x(:,7);
Ygm=x(:,8);
Zgm=x(:,9);
Tgg=x(:,10);

for w=1:length(Xgm)
if qwg(w)<0 ||qwg(w)<1e-13
    qwg(w)=0;
end
end
ywvmol=(RH./100).*(Pwv(Ta)./Pa); %Fração molar de água no ar
WMha = (1-ywvmol).*WMa+ywvmol.*0.01802; %Massa molar do ar úmido
zetag=(ywvmol.*(0.01802./WMha))./(1-ywvmol.*(0.01802./WMha));
qwg=qwg; %Vazão de vapor de água
ygg=(qvc(end)./(qvc(end)+qarg+qwg)); %Fração de vapor do componente em relação ao gás
ywvg=(qwg./ (qvc(end)+qarg+qwg));
roajetg=roa(Pa,Tgg); %Densidade do ar no jato
rowvjetg =rowv(Pa,Tgg); %Densidade do vapor de água no jato
rovjetg = rov(Pa,Tgg); %Densidade da fase vapor no jato
rogg=1./(((1-ygg-ywvg)./roajetg)+(ygg./rovjetg)+(ywvg./rowvjetg)); % Densidade do gás no jato
qMg=sqrt(Prg.^2+Pyg.^2+Pzg.^2); %Momento do jato
ujg=qMg./ (qjetg); %Velocidade do gás
Ajetg=qjetg./ (ujg.*rogg); %Área da seção transversal
Rjg=sqrt(Ajetg./pi()); %Raio
sintetag=(Pyg./ (pi().*(Rjg.^2).*rogg.*(ujg.^2)));
tetag= asin(sintetag); %Ângulo de inclinação

%Verificando se o jato toca o solo para correção do raio
for w=length(Xgm):1
if Ygm(w)==(Rjg(w)*cos(tetag1))
Rjg(w)=Ajetg(w)./(4.*Ygm(w));
end
end
for w=length(Xgm):1
if Ygm(w)<(Rjg(w)*cos(tetag1))
Rjg(w)=Ajetg(w)./(4.*Ygm(w));
tetag(w)= 0;
end
end

ugasg=ujg; %Velocidade da fase gás
ycompg = (ygg.*(1./rovjetg))./(ygg.*(1./rovjetg)+(1-ygg-ywvg).*(1./roamb)+ywvg.*(1./rowvjetg)); %Concentração média volumétrica
cjmolg=(ygg.*(1/WM(i)))./(ygg.*(1/WM(i))+(1-ygg-ywvg).*(1/WMa)+ywvg.*(1/WMw)); % Concentração média molar

%Cálculo da constante de decaimento na Região Monofásica
%-----
%Velocidade e concentração
Ccg=1./ ((sqrt(rojet(end)./roamb)).*((2*Rjet(end))./Xjet(end)));
% Temperatura
Ccg2= ((Tcent(end)-Ta)/(Tg(end)-Ta))/ ((sqrt(rojet(end)./roamb)).*((2*Rjet(end))./Xjet(end)));

```

Apêndice

```

%Variáveis na Linha Central
%-----
Ccentlongg=Ccentlong(end).*Ccg.*(2.*Rjet(end)./(Xgm)).*sqrt(rojet(end)./roamb); %Concentração volumetrica
Ccentmasslongg=(Ccentlongg.*rofv)/(Ccentlongg.*rofv+(1-Ccentlongg).*roamb); %Concentração mássica
ccentmolmaxlongg=(Ccentmasslongg.*(1/WM(i))./(Ccentmasslongg.*(1/WM(i))+1-Ccentmasslongg)).*(1/WMa)); %Concentração molar
Ugcentlongg=(Ugcentlong(end)).*Ccg.*(2.*Rjet(end)./(Xgm)).*sqrt(rojet(end)./roamb); %Velocidade
Tcentg3=((Tgg-Ta).*Ccg2.*(2.*Rjet(end)./(Xgm)).*sqrt(rojet(end)./roamb))+Ta; %Temperatura

resultmp = [Xgm Xgm-xv0 [] [] [] [] [] [] [] Tgg Tgg-273.15 ugasg Tcentg3 Tcentg3-273.15 Ugcentlongg Ccentlongg Ygm];

figure (7)
subplot (3,1,1),plot(Xgm,Tgg),grid,xlabel('Distance(m)'),ylabel('Temperature (K)')
subplot (3,1,2),plot(Xgm,ycomp),xlabel('Distance axial'),ylabel('Vol. Concentration')
subplot (3,1,3),plot(Xgm,Tcentg3,'b'),grid,xlabel('Distance(m)'),ylabel('Centerline Temperature (K)')

figure (8)
subplot (2,1,1),plot(Xgm,Ygm),grid,xlabel('Distance axial'),ylabel('Altura')
subplot (2,1,2),plot(Xgm,u),xlabel('Distance (m)'),ylabel('Velocity')

figure (9)
plot(Xgm,Ygm,'b',Xjet,Yjet,'r'),grid,xlabel('Distance (m)'),ylabel('height (m)')

% União dos gráficos
figure(10)
plot(Xjet,ugas,'r',Xgm,ugas,'b')
figure(11)
plot(Xjet,Tcent,'r',Xgm,Tcentg3,'b')
figure(12)
plot(Xjet,Tg,'r',Xgm,Tgg,'b')
figure(13)
plot(Xjet,Ccentlong,'r',Xgm,Ccentlongg,'b')

% Raio Critico
Rcritico=real(((sp+xv0)/5).*sqrt(-log((LEL(i)/100)/Ccentlong))); %LEL
Rcriticog=real(((sg+sp(end)+xv0)/5).*sqrt(-log((LEL(i)/100)/Ccentlongg))); %LEL
Rcriticol=real(((sp+xv0)/5).*sqrt(-log((LEL(i)/200)/Ccentlong))); %1/2LEL
Rcriticog1=real(((sg+sp(end)+xv0)/5).*sqrt(-log((LEL(i)/200)/Ccentlongg))); %1/2LEL
Rcritico2=real(((sp+xv0)/5).*sqrt(-log((LEL(i)/400)/Ccentlong))); %1/4LEL
Rcriticog2=real(((sg+sp(end)+xv0)/5).*sqrt(-log((LEL(i)/400)/Ccentlongg))); %1/4LEL

% _____ Volume Inflamável _____
%LEL
for n = 2:length(Xjet)
Vtp1(n)=(pi/3).*(((Rcritico(n)).^2)+(Rcritico(n)).*(Rcritico(n-1)))+(Rcritico(n-1)).^2).*(Xjet(n)-Xjet(n-1));
Vtotp1=sum(Vtp1(1,1:n));
end
for q = 2:length(Xgm)
if (Ygm(w)-(Rcriticog1(w)*cos(tetag(w))))>=0
for m = 2:length(Xgm)
Vg1(m)=(pi/3).*((Rcriticog(m).^2+Rcriticog(m)*Rcriticog(m-1)+Rcriticog(m-1)^2).*(Xgm(m)-Xgm(m-1)));
Vtog1=sum(Vg1(1,1:m));
end
else
for n = 2:length(Xgm)
Vg1(n)=(4/3).*((Xgm(n)-Xgm(n-1)).*(Rcriticog(n)*Rjg(n)+sqrt(Rcriticog(n)*Rjg(n)*Rcriticog(n-1)*Rjg(n-1))+Rcriticog(n-1)*Rjg(n-1)));
Vtog1=sum(Vg1(1,1:n));
end
end
end
VTOT1=Vtotp1+Vtog1;

%1/2LEL
for n = 2:length(Xjet)
Vtp2(n)=(pi/3).*((Rcriticol(n).^2+Rcriticol(n)*Rcriticol(n-1)+Rcriticol(n-1)^2).*(Xjet(n)-Xjet(n-1)));
Vtotp2=sum(Vtp2(1,1:n));
end
for q = 2:length(Xgm)
if Ygm(w)>=(Rcritico2(w)*cos(tetag(w)))
for m = 2:length(Xgm)
Vg2(m)=(pi/3).*((Rcriticog1(m).^2+Rcriticog1(m)*Rcriticog1(m-1)+Rcriticog2(m-1)^2).*(Xgm(m)-Xgm(m-1)));
Vtog2=sum(Vg2(1,1:m));
end
else
for n = 2:length(Xgm)
Vg2(n)=(4/3).*((Xgm(n)-Xgm(n-1)).*(Rcriticog1(n)*Rjg(n)+sqrt(Rcriticog1(n)*Rjg(n)*Rcriticog1(n-1)*Rjg(n-1))+Rcriticog1(n-1)*Rjg(n-1)));
Vtog2=sum(Vg2(1,1:n));
end
end
end
VTOT2=Vtotp2+Vtog2;

%1/4LEL
for n = 2:length(Xjet)
Vtp3(n)=(pi/3).*((Rcritico2(n).^2+Rcritico2(n)*Rcritico2(n-1)+Rcritico2(n-1)^2).*(Xjet(n)-Xjet(n-1)));
Vtotp3=sum(Vtp3(1,1:n));
end
for q = 2:length(Xgm)
if Ygm(w)>=(Rcritico2(w)*cos(tetag(w)))
for m = 2:length(Xgm)
Vg3(m)=(pi/3).*((Rcriticog2(m).^2+Rcriticog2(m)*Rcriticog2(m-1)+Rcriticog2(m-1)^2).*(Xgm(m)-Xgm(m-1)));
Vtog3=sum(Vg3(1,1:m));
end
else
for n = 2:length(Xgm)
Vg3(n)=(4/3).*((Xgm(n)-Xgm(n-1)).*(Rcriticog2(n)*Rjg(n)+sqrt(Rcriticog2(n)*Rjg(n)*Rcriticog2(n-1)*Rjg(n-1))+Rcriticog2(n-1)*Rjg(n-1)));
Vtog3=sum(Vg3(1,1:n));
end
end
end
VTOT3=Vtotp3+Vtog3;

```

Apêndice

```

resu=[VTOT1 VTOT2 VTOT3];

% Isolinhas Verticais
figure(14)
plot(Xjet,h,'c o'),grid,xlabel('Distance (m)'),ylabel('Drop height (m)')
hold on
handle1=plot(Xjet,max(0,real(Yjet-Rcritico.*cos(teta))),'r',Xjet,max(0,real(Yjet+Rcritico.*cos(teta))),'r',Xgm,max(0,real(Ygm-
(Rcriticog.*cos(tetag))),'r',Xgm,max(0,real(Ygm+(Rcriticog.*cos(tetag))),'r'),grid,xlabel('Distância (m)'),ylabel('Altura (m)');
set(handle1,'LineWidth',1);
hold on
handle2=plot(Xjet,max(0,real(Yjet-Rcritico1.*cos(teta))),'m',Xjet,max(0,real(Yjet+Rcritico1.*cos(teta))),'m',Xgm,max(0,real(Ygm-
(Rcriticog1.*cos(tetag))),'m',Xgm,max(0,real(Ygm+(Rcriticog1.*cos(tetag))),'m'),grid,xlabel('Distância (m)'),ylabel('Altura (m)');
set(handle2,'LineWidth',1);
hold on
handle3=plot(Xjet,max(0,real(Yjet-Rcritico2.*cos(teta))),'b',Xjet,max(0,real(Yjet+Rcritico2.*cos(teta))),'b',Xgm,max(0,real(Ygm-
(Rcriticog2.*cos(tetag))),'b',Xgm,max(0,real(Ygm+(Rcriticog2.*cos(tetag))),'b'),grid,xlabel('Distância (m)'),ylabel('Altura (m)');
set(handle3,'LineWidth',1);
hold on
handle4=plot(Xjet,max(0,real(Yjet)),'-k',Xgm,max(0,real(Ygm)),'-k');
set(handle4,'LineWidth',1);
hold on

% Isolinhas Laterais
figure(15)
handle1=plot(Xjet,real(0-Rcritico),'r',Xjet,real(0+Rcritico),'r',Xgm,real(Zgm-
Rcriticog),'r',Xgm,real(Zgm+Rcriticog),'r'),grid,xlabel('Distância (m)'),ylabel('Largura (m)');
set(handle1,'LineWidth',1);
hold on
handle2=plot(Xjet,real(0-Rcritico1),'m',Xjet,real(0+Rcritico1),'m',Xgm,real(Zgm-
Rcriticog1),'m',Xgm,real(Zgm+Rcriticog1),'m'),grid,xlabel('Distância (m)'),ylabel('Largura (m)');
set(handle2,'LineWidth',1);
hold on
handle3=plot(Xjet,real(0-Rcritico2),'b',Xjet,real(0+Rcritico2),'b',Xgm,real(Zgm-
Rcriticog2),'b',Xgm,real(Zgm+Rcriticog2),'b'),grid,xlabel('Distância (m)'),ylabel('Largura (m)');
set(handle3,'LineWidth',1);
hold on
for l=1:length(Xjet)
    Zjete(l)=0;
end
Zjet=Zjete';
handle4=plot(Xjet,Zjet,'k',Xgm,Zgm,'k');
set(handle4,'LineWidth',1);
hold on
grid on
hold off

```

D.8 Rotina “CCPS_diameter.m”

```
function [dd] = CCPS_diameter (Tb, Ts, Ta, Pa, Pe, uf, ue, phimf, rofl, rofv, i)

parameters;
Propriedades;

% Diâmetro por quebra mecânica
Wec = 11;
dpl = (Wec*os (Tb)) / (roa (Pa, Ta) * (uf^2));

% Diâmetro por flashing break-up
gama = kl (Tb) / (rofl * Cpl (Tb));
uac = uf - ue; % Velocidade de aceleração
Csub = phimf * (rofl / rofv) * sqrt (pi () * gama); % Taxa de crescimento da bolha
ubub = (Csub^2) * ((10e10) ^ (1/3)); % Velocidade de crescimento da bolha
urel = sqrt (uac^2 + ubub^2);
dp2 = (Wec * os (Tb)) / (rofv * (urel^2));

% Diâmetro representativo
dpr = min (dpl, dp2);
if dpr == dpl
    disp ('CCPS_Mechanical break up')
else
    disp ('CCPS_Flashing break up')
end
% Diâmetro médio
dd = dpr * exp (2.5 * (log (1.8) ^ 2));
```

D.9 Rotina “Phast_diameter.m”

```
function [dd] = phast_diameter (Te, Pe, Ts, Tb, Pa, ue, de, L, Cdl, i)

parameters;
Propriedades;

Cdl=1;
T0=300;
Tsata = fzero (@P_Vapor, T0, [], Pa, i); %Temperatura de saturação à Pa
DTsh = Te - Tsata; %Grau de superaquecimento

Wev = (rov (Pe, Te) * (ue^2) * de) / os (Te);
phi = 1 - exp (-2300 * (rov (Pe, Te) / rol (Te)));

DTshA = (Lv (Te) / Cpl (Te)) * (rov (Pe, Te) / rol (Te)) * 48 * ((Wev ^ (-1/7)) / phi); %Início da zona de transição (ponto A)
DTshB = (Lv (Te) / Cpl (Te)) * (rov (Pe, Te) / rol (Te)) * 108 * ((Wev ^ (-1/7)) / phi); %Fim da zona de transição (ponto B)

ddmin = 10e-6; %Menor tamanho de gota atingido
ddb = 80e-6; %Tamanho de gota no fim da região de transição

%Cálculo do tamanho médio da gota considerando quebra mecânica
L_de = L / de;
if L_de > 0.1 && L_de < 50
    L_de = L / de;
elseif L_de <= 0.1
    L_de = 0.1;
elseif L_de > 50
    L_de = 50;
end

Re10 = (rol (Te) * (ue / Cdl) * de) / v1 (Te);
We10 = (rol (Te) * ((ue / Cdl) ^ 2) * de) / os (Te);

ddA = de * (74 * (We10 ^ (-0.854)) * (Re10 ^ 0.441) * (L_de ^ 0.114) * ((v1 (Te) / v1w (273.15)) ^ 0.971) * ((os (Te) / osw (273.15)) ^ (-0.368)) * ((rol (Te) / rowl (273.15)) ^ (-0.107)));

%Critério
if DTsh <= DTshA
    disp ('Phast_Mechanical break-up')
    dd=ddA;
elseif DTsh > DTshA && DTsh <= DTshB
    disp ('Phast_Transition')
    dd= ddA - (((DTsh - DTshA) / (DTshB - DTshA)) * (ddA - ddB));
elseif DTsh > DTshB
    disp ('Phast_Fully flashing')
    dd= max (ddmin, (min (ddA, ddB) - (1e-7 * (DTsh - DTshB))));
end
end
```


D.10 Rotina “myevents.m”

```
function [value, isterminal, direction] = myevents(g, w, WM, i)
    isterminal = [1, 1];
    direction = [0, 0];

    parameters;
    Propiedades;
    % differential variables
    qar=w(1);
    Py = w(2);
    Px = w(3);
    Xjet = w(4);
    Yjet=w(5);

    %----Drop model----
    udy = w(6);
    udx = w(7);
    h=w(8);
    Xx = w(9);
    md= w(10);
    Td = w(11);

    Avn = 6.02214076e23;
    rod=rol(Td);
    Dd= ((md/rod)*(6/pi()))^(1/3);
    % estimation of molecular diameter
    vmol = WM(i)/(rod*Avn); % molecular volume
    dmol = 2*(3*vmol/(4*pi))^(1/3); % molecular diameter

    value(1) = Dd - dmol; % simulation must stop when the droplet disappears before hitting the ground
    % value = [Dd - dmol, h<=0];
    value(2) = h-0; % simulation must stop when there is droplet hitting the ground
```

D.11 Rotina “ftwo3.m”

```
function dF = ftwo3(g, w, g, R, WM, Pa, Ta, uw, Tb, qsf, WMa, ql0, dd, phimf, Tref, epsilon, RH, uf, Af, md0, rof, df, xv0, i)

    parameters;
    Propiedades;
    dF = zeros(size(w));

    %----Jet model----
    qar=w(1);
    Py = w(2);
    Px = w(3);
    Xjet = w(4);
    Yjet=w(5);

    %----Drop model----
    udy = w(6);
    h=w(7);
    Xx = w(8);
    md= w(9);
    Td = w(10);
    qw=w(11);
    qjet=w(12);
    qvc=w(13);
    Tg=w(14);

    if qw<0 || qw< 1e-13
        qw=0;
    end
    Dd= ((md/rol(Td))*(6/pi()))^(1/3);
```

```

% -----
% jet model
% -----
ymol=(RH/100)*(Pwv(Ta)/Pa);           %Fração molar de vapor de água no ar
WMha = (1-ymol)*WMA+ymol*0.01802;     %Massa molar do ar úmido
zeta=(ymol*(0.01802/WMha))/(1-(ymol*(0.01802/WMha)));
qlc=qsfc-qvc;                         %Vazão de líquido do componente

Raz=(Pwv(Tg)/Pa);                     %Razão de vapor de água
phil=qlc/qjet;                         %Fração mássica de líquido do componente
phiv=qvc/qjet;                         %Fração mássica de vapor do componente
phia=qar/qjet;                         %Fração mássica de ar
phiw=qw/qjet;                          %Fração mássica de água
yl=( phil*(1/WM(i)))/( phil*(1/WM(i))+phiv*(1/WM(i))+phia*(1/WMA)+phiw*(1/0.01802));
ywyl=ywv/yl;

%Para o caso de haver água condensada
if ywyl < Raz
    ywv=1;
    qwv=qw;
    qwl=0;
else
    ywv= ((1-ymol-yl)*(Pwv(Tg)/Pa))/(1-(Pwv(Tg)/Pa));
    ywv= ((ywv)/(ywv+(1-ywv)*(WMA/WM(i))));
    qwv=qw*ywv;
    qwl=qw-qwv;
end

Nd=ql0/md0;                           %Número de gotas
phimg=((qar+qvc+qwv)/qjet);             %Fração de gás no jato
yg=(qvc/(qvc+qar+qwv));                %Fração de vapor do componente no gás
ywv=(qwv/(qvc+qar+qwv));               %Fração de vapor de água no gás
roajet=roa(Pa,Tg);                     %Densidade do ar no jato bifásico
rolcjet = rol(Td);                      %Densidade da fase líquida do componente
rowljet = rowl(Tg);                     %Densidade da fase líquida da água
rowvjet = rowv(Pa,Tg);                  %Densidade da fase vapor da água
rovjet = rov(Pa,Tg);                    %Densidade da fase vapor do componente
rog=1/(((1-yg-ywv)/roajet)+(yg/rovjet)+(ywv/rowvjet)); % Densidade do gás no jato
xl=qlc/(qlc+qwl);                      %Fração do componente no líquido
xwl=qwl/(qlc+qwl);                      %Fração de água no líquido
roljet = 1/((xl/rolcjet)+(xwl/rowljet)); %Densidade total da fase líquida

rojet = 1/(((1-phimg)/roljet)+(phimg/rog)); %Densidade total do jato

qM=sqrt(Px^2+Py^2);                     %Momento do jato bifásico
ujet=qM/(qjet);                         %Velocidade do jato bifásico
Ajet=qM/((ujet^2)*rojet);                %Área do jato
Rjet=sqrt(Ajet/pi());                   %Raio
sinteta=(Py/(pi()*Rjet^2)*rojet*(ujet^2));
teta=asin(sinteta);                     % Ângulo de inclinação do jato(em radianos)
Vg=(qvc+qar+qwv)/rog;                   % Volume de gás por segundo
Vd=((4*pi()*((Dd/2)^3))/3)*Nd;           % Volume ocupado pelas gotas por segundo
Kg=Vg/(Vg+Vd);                          % Fração ocupada pelo gás
ugas=(qvc+qar+qwv)/(rog*Kg*Ajet);       %Velocidade da fase gás
roamb=roa(Pa,Ta);                        %Densidade do ar no ambiente

%Ar arrastado no jato
dF(1)=(2*pi()*Rjet)*roa(Pa,Ta)*(0.0806*sqrt(rojet/roa(Pa,Ta))*abs(ujet-uw*cos(teta))+0.5*abs(sin(teta))*cos(teta))*uw*(1+(epsilon*Rjet)^(1/3))*(1/(1+zeta));
%Fluxo de momento na direção y
if teta>=pi/2 && teta<0
    dF(2)=(pi()*Rjet^2)*g*(roamb-rojet)+0.3*pi()*Rjet*roamb*(uw^2)*cos(teta)*sin(teta)*abs(sin(teta));
elseif teta>=0 && teta<pi/2
    dF(2)=(pi()*Rjet^2)*g*(roamb-rojet)-0.3*pi()*Rjet*roamb*(uw^2)*cos(teta)*sin(teta)*abs(sin(teta));
end
%Fluxo de momento na direção x
dF(3) = uw*dF(1) + (0.3*pi()*Rjet*roamb*(uw^2)*abs((sin(teta))^3));
% Deslocamento do jato em x
dF(4)=cos(teta);
% Altura da linha central
dF(5)=sin(teta);

%----Drop model----
%-----Filme-----
% Na teoria do filme, as propriedades da mistura de gás e vapor são avaliadas
% na temperatura e concentração de referência
Treffilm=Td+(1/3)*(Tg-Td);              % Temperatura de referência
Pvsd = Pvs(Td);                          % Pressão de vapor na superfície da gota (Pa)
xseq=Pvsd/Pa;                             % Fração molar
ys=(xseq)/(xseq+(1-xseq)*(WMA/WM(i)));   % Fração de vapor do componente na superfície da gota (mássica)
Yreffilm = ys*(1/3)*(yg-ys);              % Concentração de referência (mássica)
xref=(Yreffilm*(1/WM(i)))/(Yreffilm*(1/WM(i))+1-Yreffilm*(1/WMA)); % Concentração de referência (molar)
WMgf = xref*WM(i)+(1-xref)*WMA;          % Peso molar do gás no filme

```

```

% ---Propriedades no filme---
rovfilm = rov(Pa,Treffilm); % Densidade do vapor no filme
roafilm = roa(Pa,Treffilm); % Densidade do ar no filme
romfi = 1/((Yreffilm/rovfilm)+((1-Yreffilm)/roafilm)); % Densidade da mistura de vapor no filme mais o gás livre
vvfilm = vv(Treffilm); % Viscosidade do vapor no filme
vafilm = va(Treffilm); % Viscosidade do ar no filme
ogvfvf = ((1+sqrt(vvfilm/vafilm))*((WMa/WM(i))^(1/4)))^2)/(sqrt(8)*sqrt(1+(WM(i)/WMA)));
ogvvf = ((1+sqrt(vafilm/vvfilm))*((WM(i)/WMA)^(1/4)))^2)/(sqrt(8)*sqrt(1+(WMA/WM(i))));
vgfm = (xref*vvfilm)/(xref+(1-xref)*ogvfvf) + ((1-xref)*vafilm)/(xref*ogvvf+(1-xref)); % Viscosidade da mistura de gás no filme
karfilm = kar(Treffilm); % Condutividade térmica do vapor no filme
kvfilm = kv(Treffilm); % Condutividade térmica do ar no filme
ogv = ((1+sqrt(kvfilm/karfilm))*((WMA/WM(i))^(1/4)))^2)/(sqrt(8)*sqrt(1+(WM(i)/WMA)));
ogv = ((1+sqrt(karfilm/kvfilm))*((WM(i)/WMA)^(1/4)))^2)/(sqrt(8)*sqrt(1+(WMA/WM(i))));
kgfm = ((xref*kvfilm)/(xref+(1-xref)*ogv) + ((1-xref)*karfilm)/(xref*ogv+(1-xref))); % Condutividade térmica da mistura de gás no filme
Cpmf = Cpv(Treffilm)*Yreffilm +Cpva(Treffilm)*(1-Yreffilm); % Capacidade calorífica do gás no filme

%---Difusividade no filme
WMAB = 2*(1/((1/(WM(i)*1000))+1/(WMA*1000)));
% Diffusivity model (Wilke and Lee in The Properties of Gases and Liquids)
epsilonk_a = 97;
epsilonk_b = 1.15*Tb;
epsilonk_ab = sqrt(epsilonk_a*epsilonk_b);
Tast = Treffilm/epsilonk_ab;
omegaD = 1.06036/(Tast^0.15610) + 0.19300/exp(0.47635*Tast) + 1.03587/exp(1.52996*Tast) + 1.76474/exp(3.89411*Tast);
rob = rol(Tb);
Vb = 1/((rob/(WM(i)*1000))/1000); %Volume molar do liquido à Tb
sigmaa = 3.62;
sigmab = 1.18*(Vb^(1/3));
sigma_ab = (sigmaa+sigmab)/2;
Dm = 1e-4*((3.03 - 0.98/sqrt(WMAB))*(le-3)*(Treffilm^(3/2))/((Pa/le5)*sqrt(WMAB)*(sigma_ab^2)*omegaD)); % Difusividade da mistura

Sc = vgfm/(romfi*Dm);
Pr = (Cpmf*vgfm)/kgfm; % Prandt number
udgyudyugas*sin(teta); %Velocidade relativa na direção y
RE= (Dd*abs(udgy)*rog)/vgfm; %Número de reynolds da gota

if ys>=0.99
    BM=1;
else
    BM = (ys-yg)/(1-ys);
end
if BM==-1
    BM=-0.99;
end
% Determinando BT
% Números de Schmidt e Nusselt modificados
if RE<=1 && (Pr>0.25 && Pr<100) && (Sc>0.25 && Sc<100)
    fref = 1;
    Sh = 1+((1+RE*Sc)^(1/3))*fref;
    Nu = 1+((1+RE*Pr)^(1/3))*fref;
elseif RE>1 && RE<=400 && (Pr>0.25 && Pr<100) && (Sc>0.25 && Sc<100)
    fref = RE^(0.077);
    Sh = 1+((1+RE*Sc)^(1/3))*fref;
    Nu = 1+((1+RE*Pr)^(1/3))*fref;
else %RE>400
    Sh=2+0.6*(RE^(0.5))*(Sc^(1/3));
    Nu=2+0.6*(RE^(0.5))*(Pr^(1/3));
end

FM = ((1+BM)^0.7)*(log(1+BM)/BM);
Shm = 2+((Sh-2)/FM);

%Processo iterativo para determinar BT
BT=BM;% estimativa inicial
Le = kgfm/(romfi*Dm*Cpmf);
if Le>1
    Le=1;end
if Le==1
    BT=BM;
    FT = ((1+BT)^0.7)*(log(1+BT)/BT);
Num =2+((Nu-2)/FT);
else
iter=0;
tol = 0.0001;
error = 0.1;

```

Apêndice

```

while (error > tol)
FT = ((1+BT)^0.7) * (log(1+BT)/BT);
Num = 2 + ((Nu-2)/FT);
ph = (Cpv(Treffilm)/Cpmf) * (Shm/Num) * (1/Le);
BTn = ((1+BM)^ph) - 1;
if BTn == -1
    BTn = -0.99;
end
error = abs(BTn-BT);
BT = BTn;
iter = iter + 1;
if iter >= 20; break; end
end
end

%Coeficiente de Arraste CD
if RE <= 0.1
    if RE == 0
        RE = 0.0001;
    end
    CD = 24/RE;
elseif RE > 0.1 && RE <= 1000
    CD = (24/RE) * ((1+0.15*RE)^0.687);
elseif RE > 1000
    CD = 0.44;
end

%Coeficiente para uma gota evaporando
if BM < 0.78
    aM = 1;
elseif BM > 0.78
    aM = 0.75;
end
CDev = (CD / ((1+BM)^(aM)));
udx = ujet * cos(teta); %Velocidade da gota na direção axial
udy = sqrt(abs(udy)^2 + udx^2); %Velocidade relativa da gota

% Velocidade vertical da gota
dF(6) = ((g * ((rog/rol(Td)) - 1)) - (CDev * (pi * ((Dd)^2) / 4)) * (0.5 * rog * udy * abs(udy)) / (md))) / udy;
% Trajetória
dF(7) = udy / udy; %Altura
dF(8) = (udx + uw) / udy; % Posição horizontal
% Massa da gota
dF(9) = -pi * Dd * romfi * Dm * Shm * log(1+BM) / udy;
% Temperatura da gota
if Td < Tb
dF(10) = (pi * Dd * Num * kgfm * (Tg - Td) * (log(1+BT) / BT) / udy + dF(9) * (Lv(Td) + (Cpv(Td) - Cp1(Td)) * (Td - Tref))) / (md * Cp1(Td)));
elseif Td > Tb
dF(10) = (pi * Dd * Num * kgfm * (Tg - Td) / udy + dF(9) * (Lv(Td) + (Cpv(Td) - Cp1(Td)) * (Td - Tref))) / (md * Cp1(Td));
end

dF(11) = zeta * dF(1); %Vazão da vapor de água
dF(12) = dF(1) + dF(11); %Vazão total
dF(13) = -Nd * dF(9); %Vazão de vapor
%Temperatura da fase gás
dF(14) = (integral(Cpva, Tg, Ta) * dF(1) + dF(11) * (integral(Cpww, Tg, Ta) + (1 - yvwmass) * Lvw(Tg)) - (Nd * ((integral(Cpv, Tg, Td) - Lv(Td)) * dF(9) + md * Cp1(Td) * dF(10)))) / (Cpv(Tg) * qvc + Cpva(Tg) * qar + Cpww(Tg) * qw);

```

D.12 Rotina “gasdisp2.m”

```

function dF =
gasdisp2(t,x,Ta,Pa,uw,qvcg,phimf,Tb,Tref,qsf,epsilon,RH,roj,qarj,qj,Rj,Xj,alfa,i)

clc;
parameters;
Propriedades;

dF = zeros(size(x));
%----Jet model----
qarg=x(1);
qwg=x(2);
qjetg=x(3);
Pyg = x(4);
Pxc = x(5);
Pzg = x(6);
Xgm =x(7);
Ygm=x(8);
Zgm=x(9);
Tgg=x(10);

if Ygm<0
    Ygm=0;
end

if qwg<0 || qwg< 1e-13
    qwg=0;
end

%
ywvmol=(RH/100)*(Pwv(Ta)/Pa); %Fração molar de água no ar
WMha = (1-ywvmol)*WMa+ywvmol*0.01802; %Massa molar do ar úmido
zetag=(ywvmol*(0.01802/WMha))/(1-(ywvmol*(0.01802/WMha)));

qwvg=qwg;
ygg=(qvcg/(qvcg+qarg+qwvg)); %Fração de vapor do componente em relação ao
gás
ywvg=(qwvg/(qvcg+qarg+qwvg));

roamb = roa(Pa,Ta); % Densidade do ar no ambiente
roajetg=roa(Pa,Tgg); % Densidade do ar no jato bifásico
rowvjetg =rowv(Pa,Tgg);
rovjetg = rov(Pa,Tgg);
rogg=1/((1-ygg-ywvg)/roajetg)+(ygg/rovjetg)+(ywvg/rowvjetg); % Densidade do gás no jato
qMg=sqrt(Pxc^2+Pyg^2+Pzg^2); % Momento do jato bifásico
ujg=qMg/(qjetg); % Velocidade do jato bifásico
Ajetg=qjetg/(rogg*ujg); % Área do jato
Rjg=sqrt(Ajetg/pi()); % Raio
sintetag=(Pyg/(pi()*Rjg^2)*rogg*(ujg^2));
tetag= asin(sintetag); % Ângulo de inclinação do jato(em radianos)

%Correção do raio para dispersão no solo
if Ygm==Rjg*cos(tetag)
    Rjg=Ajetg/(4*Ygm);
end

if Ygm>=Rjg*cos(tetag) %Jato elevado
sintetag=(Pyg/(pi()*Rjg^2)*rogg*(ujg^2));
tetag=asin(sintetag); % Ângulo de inclinação do jato(em radianos)
%Ar arrastado no jato
dF(1)=(2*pi()*Rjg)*roamb*((alfa)*sqrt(rogg/roamb)*abs(ujg-
uw*cos(tetag))+(0.5*abs(sin(tetag))*cos(tetag))*uw+1*(epsilon*Rjg^(1/3)))*(1/(1+zetag));
%Vapor de água
dF(2)=zetag*dF(1);
%Massa total
dF(3)=dF(1)+dF(2);
%Fluxo de momento na direção y
if tetag>=-pi/2 && tetag<0
dF(4)=(pi()*Rjg^2)*g*(roamb-
rogg)+0.3*pi()*Rjg*roamb*(uw^2)*cos(tetag)*sin(tetag)*abs(sin(tetag));
elseif tetag>=0 && tetag<pi/2
dF(4)=(pi()*Rjg^2)*g*(roamb-rogg)-
0.3*pi()*Rjg*roamb*(uw^2)*cos(tetag)*sin(tetag)*abs(sin(tetag));

```

Apêndice

```

end
%Fluxo de momento na direção x
dF(5) = uw*dF(1) + (0.3*pi()*Rjg*roamb*(uw^2)*abs((sin(tetag))^3));
% Momento na direção lateral
dF(6) = 0;
% Deslocamento do jato em x
dF(7)=cos(tetag);
% Altura da linha central
dF(8)=sin(tetag);
dF(9)=0;
else %Dispersão no solo
Rjg=Ajetg/(4*Ygm); % Raio corrigido
tetag=0; % Ângulo de inclinação do jato(em radianos)
uspread=Pzg/(qjetg); % Velocidade de espalhamento lateral
duds= (dF(5)*cos(tetag)+dF(4)*sin(tetag)+dF(6)*(uspread/ujg)-ujg*dF(3))/qjetg;
dAds=((dF(3)/rogg)-duds*Ajetg)/(ujg) ;
%Velocidade de arraste de ar
uent=((alfa)*sqrt(rogg/roamb)*abs(ujg-
uw*cos(tetag))+(0.5*abs(sin(tetag))*cos(tetag))*uw+1*(epsilon*Rjg)^(1/3));
%Ar
dF(1)=((4*Ygm+(Ajetg/(2*Ygm)))*roamb*((alfa)*sqrt(rogg/roamb)*abs(ujg-
uw*cos(tetag))+(0.5*abs(sin(tetag))*cos(tetag))*uw+1*(epsilon*Rjg)^(1/3)))*(1/(1+zetag));
%Vapor de água
dF(2)=zetag*dF(1);
%Massa total;
dF(3)=dF(1)+dF(2);
%Momento em y
dF(4)=0;
%Momento em x
dF(5)=uw*dF(1)-g*(rogg-roamb)*(((dF(3)/rogg)-duds*Ajetg)/(ujg))*Ygm+((Ygm/Ajetg)*(dAds)-
((4*(Ygm^2))*((uent+uspread)/ujg)/Ajetg))*Ajetg);
%Momento em z
dF(6)=4*(Ygm^2)*g*(roamb-rogg);
%Deslocamento do jato em x
dF(7)=cos(tetag);
%Variação da altura da linha central
dF(8)=((Ygm/(Ajetg))*(dAds)-(((4*Ygm^2))*((uent+uspread)/ujg)/Ajetg));
dF(9)=0;
end
%Temperatura do gás
dF(10)=(Cpva(Tgg)*(Ta-Tgg)*dF(1))/(Cpv(Tgg)*qvcg+Cpva(Tgg)*qarg+Cpww(Tgg)*qwg);
end

```