

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

RANNY RODRIGUES FREIRE

**ESTUDO DO EFEITO JOULE-THOMSON EM LIBERAÇÕES GASOSAS PARA
CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS DE RISCO**

CAMPINA GRANDE – PB

DEZEMBRO, 2021

RANNY RODRIGUES FREIRE

**ESTUDO DO EFEITO JOULE-THOMSON EM LIBERAÇÕES GASOSAS PARA
CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS DE RISCO**

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Dr. José Jailson Nicácio

CAMPINA GRANDE – PB

DEZEMBRO, 2021

F866e

Freire, Ranny Rodrigues.

Estudo do efeito Joule-Thomson em liberações gasosas para classificação de áreas de risco / Ranny Rodrigues Freire. - Campina Grande, 2023.

51 f. : il. color.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2021.

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

Referências.

1. Processos Químicos. 2. Fluidodinâmica Computacional. 3. CFD. 4. Efeito Joule-Thomson. 5. Substâncias Inflamáveis. 6. Hidrogênio. I. Alves, José Jailson Nicácio. II. Título.

CDU 66.011(043)

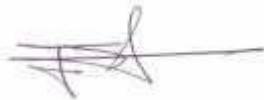
RANNY RODRIGUES FREIRE

**ESTUDO DO EFEITO JOULE-THOMSON EM LIBERAÇÕES GASOSAS PARA
CLASSIFICAÇÃO DE ÁREAS DE RISCO**

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Aprovado em 07/1/2021

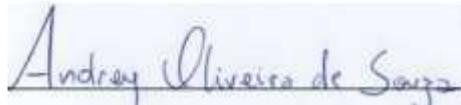
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves
Orientador



Prof. Dr. Antonio Tavernard Pereira Neto
Avaliador interno



Prof. Dr. Andrey Oliveira de Souza
Avaliador externo

CAMPINA GRANDE – PB

DEZEMBRO, 2021



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

REGISTRO DE PRESENÇA E ASSINATURAS

ATA DA DEFESA PARA CONCESSÃO DO GRAU DE MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA,
REALIZADA EM 07 DE DEZEMBRO DE 2021

(Nº 500)

CANDIDATO(A): **Ranny Rodrigues Freire**. COMISSÃO EXAMINADORA: José Jailson Nicácio Alves, Prof., Dr., UFCG, Orientador, Antônio Tavernard Pereira Neto, Prof., Dr., UFCG, Examinador Interno, Andrey Oliveira de Souza, Prof., Dr., IFPB, Examinador Externo. TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: "**Estudo do Efeito Joule-Thomson em Liberações Gasosas para Classificação de Áreas de Risco**". ÁREA DE CONCENTRAÇÃO Desenvolvimento de Processos Químicos. HORA DE INÍCIO: **14h:00** – LOCAL: **Sala Virtual, em virtude da suspensão de atividades na UFCG decorrente do corona vírus**. Em sessão pública, após exposição de cerca de 50 minutos, o(a) candidato(a) foi arguido(a) oralmente pelos membros da Comissão Examinadora, tendo demonstrado suficiência de conhecimento e capacidade de sistematização, no tema de sua dissertação, obtendo conceito **APROVADO**. Face à aprovação, declara o(a) orientador, achar-se a examinada, legalmente habilitado(a) a receber o Grau de Mestre Engenharia Química, cabendo a Universidade Federal de Campina Grande, como de direito, providenciar a expedição do Diploma, a que o(a) mesmo(a) faz jus. Na forma regulamentar, foi lavrada a presente ata, que é assinada por mim, Maricé Pereira da Silva – Secretária do PPGEQ, os membros da Comissão Examinadora e a candidata. Campina Grande, 07 de dezembro de 2021.

Maricé Pereira da Silva
Secretária

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

Antônio Tavernard Pereira Neto, Prof., Dr., UFCG
Examinador Interno

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

Ranny Rodrigues Freire
Candidata

AGRADECIMENTOS

Ser grato é uma virtude do ser humano, sou grata a muitas coisas na vida. Aqui, em especial, gostaria de agradecer a Deus, por ter me protegido e acompanhado durante toda a caminhada da vida.

Agradeço a minha família por todos os ensinamentos que construíram a pessoa que hoje sou.

Aos meus amigos do laboratório por tornarem essa caminhada mais leve: Claudemi, Felipe, Victor, Natalya e Jung. Agradeço em especial Paloma, por toda a amizade que construímos durante este período, por ser meu ombro amigo em todos os momentos.

Agradeço ao meu namorado Rodolpho por toda a parceria, apoio e incentivo.

Agradeço também ao professor Jailson pela orientação, confiança, contribuição e apoio a esta dissertação de mestrado.

RESUMO

Em plantas industriais onde é comum o manuseio de substâncias inflamáveis, atmosferas potencialmente explosivas podem ser formadas, por essa razão padrões de segurança devem ser seguidos. Neste sentido, a utilização de fluidodinâmica computacional (CFD) é importante para análises de risco mais criteriosas. A norma IEC 60079-10-1:2015 afirma que liberações de gases em alta pressão demonstram o efeito Joule-Thomson, enquanto para o hidrogênio ocorre o efeito reverso. Por sua vez, este estudo tem como objetivo fazer uso de CFD para observar a influência deste efeito. Os resultados demonstraram uma ligeira redução no perfil de temperatura para os gases em condições reais. As análises dos casos simulados em diferentes pressões concluíram que a variação de temperatura entre os gases hidrogênio e metano em condição de idealidade e não idealidade diminui conforme a pressão de armazenamento é reduzida. Os casos simulados com efeito da gravidade demonstraram que a não idealidade do gás exerce uma pequena influência na extensão da área classificada. Foi possível verificar também que o efeito Joule-Thomson não exerce influência significativa em liberações gasosas de alta pressão.

Palavras-chave: Fluidodinâmica Computacional, Joule-Thomson, hidrogênio, substâncias inflamáveis.

ABSTRACT

In industrial plants where the handling of flammable substances is common, potentially explosive atmospheres can be formed, for this reason safety standards must be followed. In this case, the use of computational fluid dynamics (CFD) is important for more careful risk analysis. The IEC 60079-10-1: 2015 standard states that high pressure gas releases demonstrate the Joule-Thomson effect, while for hydrogen the reverse effect occurs. This study aims to use CFD to observe the influence of this effect. The results showed a slight reduction in the temperature profile for gases under real conditions. The analysis of the simulated cases at different pressures concluded that the temperature variation between gases hydrogen and methane in ideal and non-ideal conditions decreases as the storage pressure is reduced. The simulated cases with gravity effect demonstrated that the non-ideality of the gas has a small influence on the extension of the classified area. It was also possible to verify that the Joule-Thomson effect has no significant influence on high pressure gas releases.

Keywords: Computational Fluid Dynamics, Joule-Thomson, hydrogen, flammable substance

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Representação de liberação de jatos de gases inflamáveis	18
Figura 2 - Representação de liberação de jatos de gases inflamáveis	19
Figura 3 - Expansão isentrópica do hidrogênio em diferentes condições iniciais.....	20
Figura 4 - Representações de sistemas de redução de pressão	21
Figura 5 - Curvas isentálpicas para o gás hidrogênio.....	23
Figura 6 - Curvas de inversão do coeficiente Joule Thomson à 1 atm.	24
Figura 7 - Representações de sistemas de redução de pressão	25
Figura 8 - Etapas de simulação	28
Figura 9 - Esboço do domínio computacional para simulação de jatos de gases inflamáveis	29
Figura 10 - Geometria construída para a simulação de jatos de gases inflamáveis	30
Figura 11 - Malha computacional da simulação de jatos de gases inflamáveis.....	31
Figura 12 - Definição de condições de contorno.....	32
Figura 13 - Contorno de simetria definido no modelo.....	33
Figura 14 - Domínio computacional da simulação de jatos de gases inflamáveis com influência da gravidade	35
Figura 15 - Malha computacional da simulação de jatos de gases inflamáveis com influência da gravidade	36
Figura 16 - Campo de velocidade no barril (Número de Mach) para o vazamento de hidrogênio ideal a 50 bar, 300K e diâmetro de orifício de 2,5 mm.....	37
Figura 17 - Campo Temperatura no barril para o vazamento de hidrogênio ideal a 50 bar, 300K e diâmetro de orifício de 2,5 mm	38
Figura 18 - Perfis de temperatura ao longo da extensão do vazamento para os gases Hidrogênio e metano ideal e real a 50 bar, 300 K e diâmetro de orifício de 2,5 mm.....	39
Figura 19 - Perfis de temperatura ao longo da extensão do vazamento para os gases Hidrogênio e metano ideal e real a 40 bar, 300 K e diâmetro de orifício de 2,5 mm.....	40
Figura 20 -- Perfis de temperatura ao longo da extensão do vazamento para os gases Hidrogênio e metano ideal e real a 30 bar, 300 K e diâmetro de orifício de 2,5 m.....	40
Figura 21 - Perfis de temperatura ao longo da extensão do vazamento para os gases Hidrogênio e metano ideal e real a 20 bar, 300 K e diâmetro de orifício de 2,5 mm.....	41
Figura 22 - Perfis de temperatura ao longo da extensão do vazamento para os gases Hidrogênio e metano ideal e real a 10 bar, 300 K e diâmetro de orifício de 2,5 mm.....	43
Figura 23 - Análise dos tipos de expansão para o gás hidrogênio.....	44
Figura 24 - Influência da gravidade na extensão da área perigosa - Hidrogênio (gás ideal)-	44
Figura 25 - Influência da gravidade na extensão da área perigosa - Hidrogênio (gás real)	44
Figura 26 - Influência da gravidade na extensão da área perigosa - Metano (gás ideal)	44
Figura 27 - Influência da gravidade na extensão da área perigosa - Metano (gás real)....	45

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Graus de risco de liberação.....	15
Tabela 2 - Tipos de zonas classificadas.....	16
Tabela 3 - Classificação da condição de vazamento segundo o número de Mach.....	18
Tabela 4 - Estudo de dependência de malha	31
Tabela 5 - Condições de contorn	32
Tabela 6 - Casos simulados sem a influência da gravidade	34
Tabela 7 - Casos simulados com a influência da gravidade.....	36
Tabela 8 - Resultados de extensão dos casos simulados sem a influência da gravidade..	42

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CFD	Fluidodinâmica Computacional
IEC	International Electrotechnical Commission
LEL	Limite inferior de inflamabilidade
SRK	Soave Redlich Kwong, Soave Redlich Kwong
SST	Shear Stress Transport

LISTA DE SÍMBOLOS

ρ	massa específica
t	tempo
\mathbf{V}	vetor velocidade da mistura
r	tensão de cisalhamento
g	gravidade
h	entalpia
λ	condutividade térmica
R	constante universal dos gases
c_p	capacidade calorífica
T	temperatura
T_c	temperatura crítica
P_c	pressão crítica
ω	fator acêntrico

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	11
1.1 Escopo do Trabalho	11
1.2 Justificativa	13
1.3 Objetivos.....	14
CAPÍTULO 2	15
2. FUNDAMENTOS	15
2.1 Classificação de áreas	15
2.2 Liberação de jatos de gases inflamáveis	17
2.3 Efeito Joule Thomson	20
2.4 Aplicações do efeito Joule Thomson.....	24
2.5 Fluidodinâmica computacional (CFD).....	26
CAPÍTULO 3	28
3. METODOLOGIA	28
3.1 Simulações em CFD de liberação de jatos de gases inflamáveis	28
3.2 Simulação em CFD de liberação de jatos de gases inflamáveis sem influência da gravidade.....	29
3.3 Simulação em CFD de liberação de jatos de gases inflamáveis com influência da Gravidade	35
CAPÍTULO 4	37
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES	37
4.1 Liberações de jatos inflamáveis para classificação de áreas	37
CAPÍTULO 5	46
5. CONSIDERAÇÕES FINAIS	46
Referências Bibliográficas	47

CAPÍTULO 1

1. INTRODUÇÃO

1.1 Escopo do Trabalho

Durante a operação normal de uma planta industrial é comum a ocorrência de pequenos vazamentos que, em casos de manuseio de substâncias inflamáveis, podem dar início a incidentes de elevadas proporções quando em contato com uma fonte de ignição (CRUZ, 2012). Nesses cenários, padrões industriais ou normas de segurança devem ser seguidos, classificando a área industrial quanto à probabilidade de formação de atmosferas explosivas. O padrão internacional IEC EN 60079-10-1:2015 define área classificada como sendo aquela na qual há presença de atmosfera explosiva, ou quantidades de gás que requeiram precauções especiais para a construção, instalação e utilização de equipamentos elétricos.

No estudo de liberações gasosas através de pequenos orifícios e em condições de alta pressão, o escoamento ocorre muito rápido, de tal modo que pode ser considerado adiabático. Desconsiderando-se ainda as perdas por atrito, o processo passa a ser aproximado de uma expansão isentrópica. Em uma expansão isentrópica, o sistema realiza trabalho sobre o meio, sem trocar calor, reduzindo sua energia interna e com isso sua temperatura.

A IEC 60079-10-1:2015 destaca a influência da densidade do gás relativa ao ar no comportamento da nuvem inflamável formada. Em liberações de baixa velocidade, gases mais densos que o ar acumulam-se ao nível do solo, enquanto que gases menos densos adquirem movimento ascendente. Em altas pressões, o gás se expande e esfria devido ao efeito Joule-Thomson, podendo se comportar inicialmente como mais pesado que o ar. No entanto, observa-se um efeito Joule-Thomson reverso para o hidrogênio, aquecendo a medida que se expande e, portanto, adquirindo um comportamento mais leve que o ar.

O efeito Joule-Thomson descreve a variação de temperatura devido a uma mudança repentina de pressão, provocada por um meio poroso ou uma válvula, por exemplo. É observado em processos de aceleração adiabática com fluxos de gases a

velocidade moderada, onde não há troca de calor com o ambiente e a variação de energia cinética pode ser desconsiderada, aproximando-se assim de um processo isentálpico. A quantificação do efeito baseia-se no desvio da idealidade dos gases, visto que, para gases ideais a temperatura permanece constante em processos onde não há variação de entalpia. Com exceção do hélio e hidrogênio, observa-se uma pequena redução da temperatura do gás durante a queda de pressão, em condição ambiente de temperatura (WARK, 1995)

Benintendi (2018) alerta que a consideração de uma expansão isentálpica para procedimentos de segurança pode causar graves erros na classificação de áreas. No estudo de liberações gasosas através de pequenos orifícios e em condições de alta pressão, o escoamento ocorre muito rápido, de tal modo que pode ser considerado adiabático. Desconsiderando-se ainda as perdas por atrito, o processo passa a ser aproximado de uma expansão isentrópica. Em uma expansão isentrópica, o sistema realiza trabalho sobre o meio, sem trocar calor, reduzindo sua energia interna e com isso sua temperatura.

A norma internacional IEC 60079-10-1:2015 recomenda a utilização de CFD como ferramenta importante no auxílio à classificação de áreas, ressaltando a necessidade de observar resultados mais próximos da realidade de cada tipo de liberação.

Com o objetivo de verificar a influência do efeito Joule Thomson em projetos de classificação de áreas, foram realizadas simulações numéricas no *software Ansys CFX 16.1*® utilizando diferentes gases. Segundo a norma IEC 60079-10-1:2015, em altas pressões de vazamento espera-se observar um resfriamento do gás metano devido à expansão, o que não é esperado para o hidrogênio.

1.2 Justificativa

Ao final do século XIX equipamentos elétricos começaram a ser instalados em ambientes industriais com presença de substâncias inflamáveis. No mesmo período surgiram as primeiras discussões a respeito do risco eminente desses equipamentos tornarem-se fontes de ignição de atmosferas explosivas, podendo culminar em explosões nas instalações industriais. Com o objetivo de reduzir este risco, equipamentos elétricos com maior grau de segurança foram desenvolvidos especificamente para serem operados em ambientes potencialmente explosivos.

Para a correta utilização deste tipo de equipamento, é de suma importância a realização de estudos que determinem a extensão de áreas com potenciais de explosividade. Neste sentido, padrões e normas internacionais foram desenvolvidos com o objetivo de realizar essa classificação de forma segura. A falta do projeto de classificação de áreas, ou até mesmo da expressão realística da classificação pode colocar em risco a segurança de todos que circundam o perímetro da indústria e regiões próximas.

Hidrogênio e correntes contendo hidrogênio apresentam problemas para classificação de áreas e seleção de equipamentos elétricos devido a sua baixa energia de ignição. A baixa densidade do hidrogênio em condições atmosféricas torna necessário que seu armazenamento seja feito em altas pressões, estados termodinâmicos distantes do equilíbrio são características desse tipo de armazenamento. Por isso, faz-se necessário que todos os fenômenos mencionados estejam em conformidade com a realidade.

1.3 Objetivos

- *Objetivos Gerais*

Este trabalho se propõe a utilizar fluidodinâmica computacional (CFD) para verificar a proposição estabelecida pelo padrão internacional quanto ao comportamento dos gases em alta pressão. Tem-se o objetivo de avaliar a influência do efeito Joule-Thomson nos gases hidrogênio e metano, na variação de temperatura ao longo do escoamento e, como consequência, na sua densidade relativa ao ar.

- *Objetivos Específicos*

- Realizar simulações de liberações de gases em condições de idealidade e não idealidade;
- Avaliar o perfil de temperatura dos gases estudados ao longo do eixo de liberação;
- Verificar a influência do efeito Joule Thomson em jatos de alto momento para fins de classificação de áreas;
- Fazer uma análise da influência da pressão de vazamento na variação da temperatura ao longo do eixo de liberação.

CAPÍTULO 2

2. FUNDAMENTOS

2.1 Classificação de áreas

O padrão internacional IEC EN 60079-10-1 define área classificada como sendo aquela na qual há presença de atmosfera explosiva, ou quantidades de gás que requeiram precauções especiais para a construção, instalação e utilização de equipamentos elétricos. Em situações práticas, onde há manuseio de substâncias inflamáveis, é difícil garantir que uma atmosfera explosiva não ocorra. Neste caso, em cenários onde a probabilidade de ocorrência de uma atmosfera explosiva é alta a segurança é depositada em equipamentos com baixa probabilidade de criar uma fonte de ignição. Sendo assim, o projeto, operação ou locação dos equipamentos de processo deve assegurar que, mesmo quando operando anormalmente, a quantidade de material inflamável ou combustível liberado seja minimizada, de modo a reduzir a extensão da área classificada (Bulgarelli, 2009).

Atmosfera explosiva por sua vez consiste de uma mistura de gás inflamável com o ar, sob condições atmosféricas, que após a ignição permite a propagação autossustentada da chama (IEC EN 60079-10-1). A liberação de gás inflamável pode advir de diferentes fontes, as mesmas são classificadas nos três seguintes graus de liberação (tabela 1):

Tabela 1 - Graus de risco de liberação

Grau de risco	Definição
Contínuo	Quando a liberação é contínua ou prevista que ocorra com frequência ou por longos períodos.
Primário	Quando espera-se que a liberação ocorra ocasionalmente durante operação normal.
Secundário	Quando não espera-se que a liberação ocorra em operação normal, e se ocorrer, é provável que o faça por curtos períodos.

Segundo a IEC EN 60079-10-1 liberações gasosas resultam em jatos de gás ou plumas no sentido da fonte de liberação dependendo dos seguintes fatores:

- Pressão no ponto de liberação
- Densidade relativa do gás
- Grau de turbulência da mistura

O momento também é uma variável importante pois leva em consideração a energia cinética do fluido. O momento relacionado a um vazamento possui influência direta no grau de mistura ar/gás. Condições de emissão com elevada enérgica cinética aumentam o nível de mistura, o que resulta em modificações na densidade da nuvem e no comportamento da dispersão (Lees, 2012).

De acordo com a densidade do gás relativa à densidade do ar o fluido pode ser classificado como negativo, neutro ou positivo. Os negativos são gases pesados, que possuem densidade maior que a do ar e tendem a depositar-se próximo ao solo. Os neutros possuem densidade próxima a densidade do ar e por isso permanecem rente ao eixo de liberação. Por fim, os positivos são gases de baixo peso molecular que são mais leves do que o ar, portanto, possuem tendência a subir. (Lees, 2012)

O padrão internacional divide ainda a área classificada em zonas, de acordo com a frequência de ocorrência e duração de uma atmosfera explosiva, como descrito na tabela 2

Tabela 2 - Tipos de zonas classificadas

Tipo de zona	Definição
Área não perigosa	Área na qual não se espera que uma atmosfera explosiva esteja presente em quantidades que requeiram precauções especiais para construção, instalação e uso de equipamentos.
Zona 0	Área na qual uma atmosfera explosiva de gás está presente continuamente.
Zona 1	Área na qual uma atmosfera explosiva de gás é provável de ocorrer em condições normais de operação.
Zona 2	Área na qual uma atmosfera explosiva de gás não é provável de ocorrer em condições normais de operação, mas se ocorrer irá persistir somente por um curto período.

Fonte: IEC EN 60079-10-1

Hidrogênio e correntes contendo hidrogênio apresentam problemas para classificação de áreas e seleção de equipamentos elétricos devido a sua baixa energia de ignição. *El predictions of minimum spark ignition energy and quenching distances for CH₄/H₂ and C₃H₈/H₂ mixtures with air (2002)* mostrou que, para garantir a segurança, misturas contendo hidrogênio em uma fração volumétrica superior a 30% deve ser consideradas como hidrogênio puro para fins de classificação.

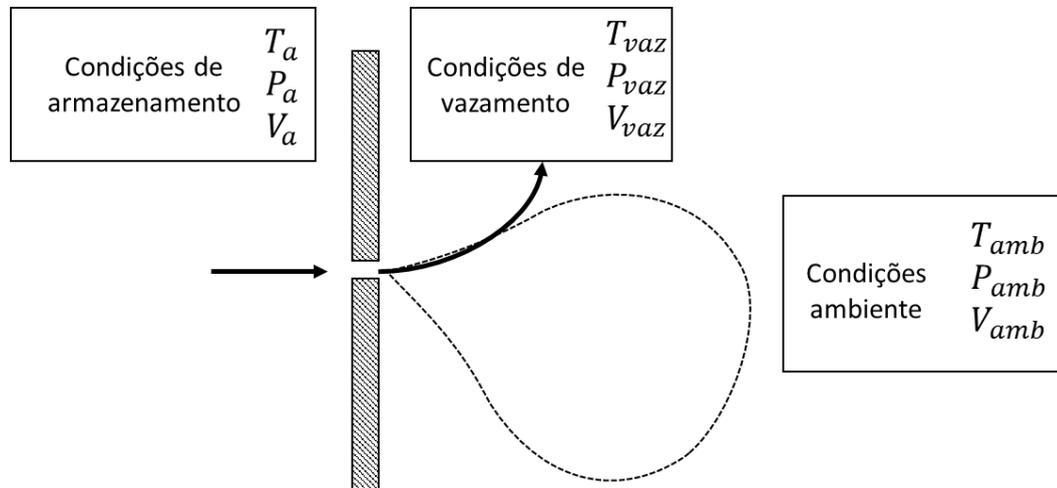
2.2 Liberação de jatos de gases inflamáveis

No estudo de liberações gasosas através de pequenos orifícios e em condições de alta pressão, o escoamento ocorre muito rápido, de tal modo que pode ser considerado adiabático. Desconsiderando-se ainda as perdas por atrito, o processo passa a ser aproximado de uma expansão isentrópica. Estes tipos de liberações possuem as seguintes características (Lees (2012)):

- Possuem formato cônico;
- Divergem do orifício gerador por um ponto virtual localizado a frente do mesmo;
- Sua dissipação ocorre por meio de uma mistura turbulenta na região de alto momento e posteriormente o efeito do empuxo é mais significativo.

Em uma expansão isentrópica que ocorre conforme ilustrado na figura 1 cujas condições de armazenamento são conhecidas, por se tratar de uma condição de liberação sônica no orifício, ou seja, cuja velocidade do gás naquele ponto se iguala a velocidade do som, os valores de temperatura, pressão e velocidade no vazamento podem ser calculadas utilizando as seguintes equações 1, 2 e 3 (Benintendi, 2010).

Figura 1 - Representação de liberação de jatos de gases inflamáveis



Fonte: da autora

$$P_{vaz} = P_a \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (1)$$

$$T_{vaz} = T_a \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right) \quad (2)$$

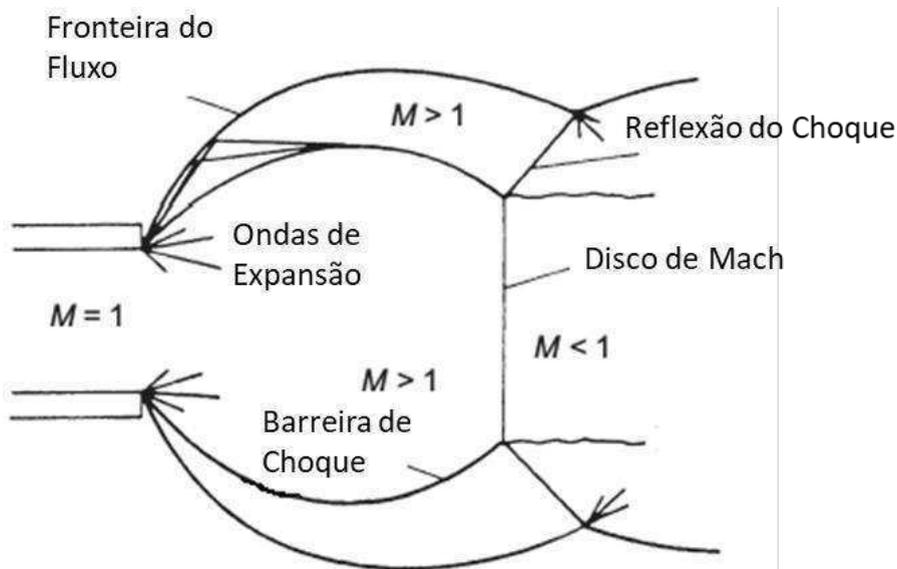
$$V_{vaz} = \left(\frac{2\gamma}{\gamma + 1} R T_a \right)^{1/2} \quad (3)$$

Após a liberação o gás adquire uma velocidade que ultrapassa a do som (supersônico) até que ocorra o choque ou formação do disco de Mach (figura 2), onde a velocidade é reduzida rapidamente e o vazamento mantém-se até que alcance as condições ambiente (Ewan e Moodie,1986). Podem ser classificados segundo o número de Mach, conforme tabela 3.

Tabela 3 - Classificação da condição de vazamento segundo o número de Mach

Número de Mach (M)	Classificação
M > 1	Supersônico
M = 1	Sônico
M < 1	Subsônico

Figura 2 - Representação de liberação de jatos de gases inflamáveis.

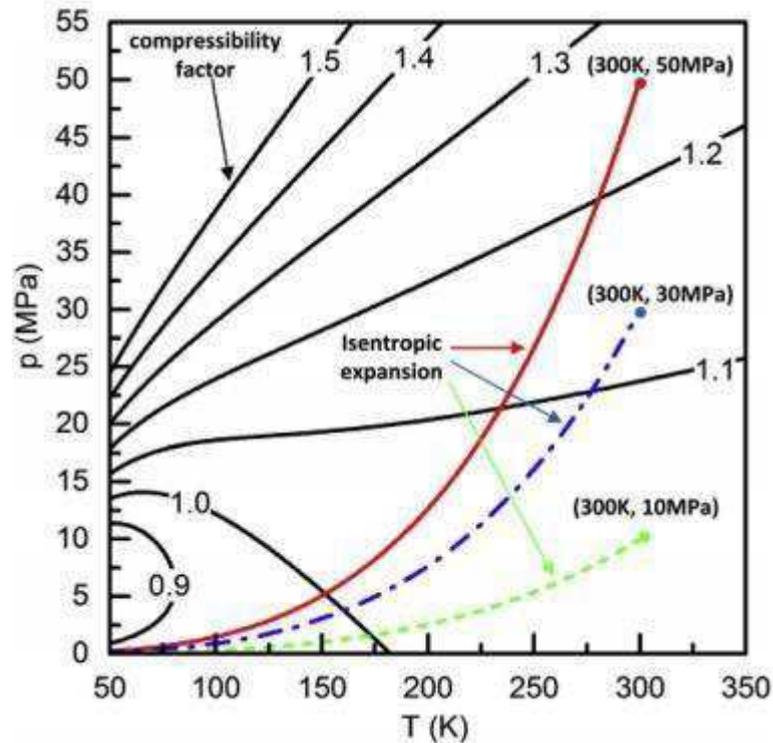


Fonte: Adaptado de Lees (2012)

A baixa densidade do hidrogênio em condições atmosféricas torna necessário que seu armazenamento seja feito em altas pressões, para que se consiga armazenar um volume considerável. Estados termodinâmicos distantes do equilíbrio são características desse tipo de armazenamento (Aceves, 2010).

A figura 3 representa os caminhos de uma expansão isentrópica do hidrogênio em pressões iniciais de 10, 30 e 50 MPa à temperatura inicial e fixa de 300 K. Para os casos de maior pressão inicial (30 e 50 MPa) as curvas isentrópicas em uma região cujo fator de compressibilidade (Z) é maior do que 1. Tornando evidente o comportamento do gás não ideal da expansão isentrópica em altas pressões.

Figura 3 - Expansão isentrópica do hidrogênio em diferentes condições iniciais



Fonte: Zhang, 2020.

A suposição do gás ideal torna-se cada vez menos válida conforme as condições iniciais se aproximam das altas pressões (e baixas temperaturas), mas geralmente é utilizada para fins de simplificação da análise (FOX, 2001)

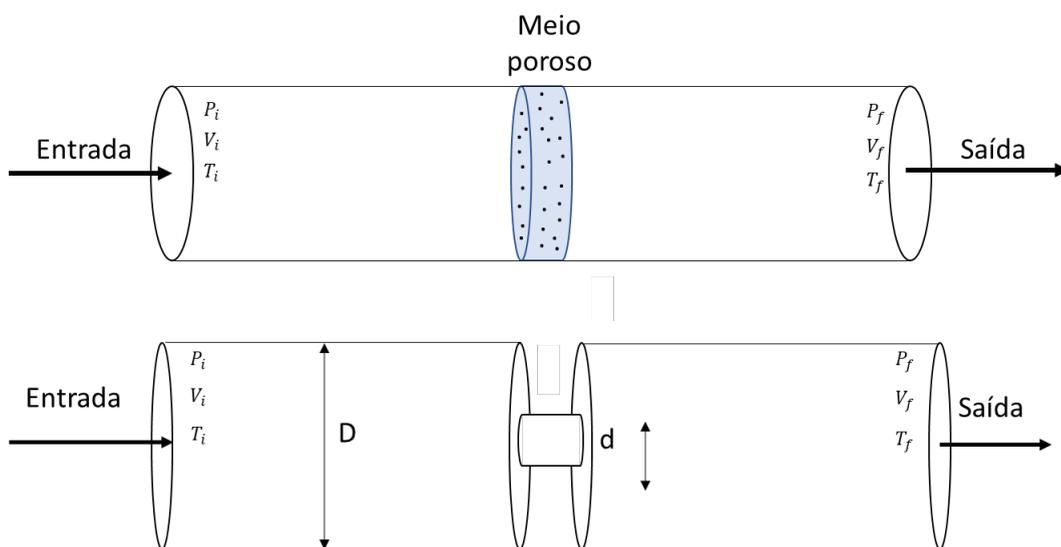
2.3 Efeito Joule Thomson

No tópico 6.3.2 sobre liberações gasosas, efeitos termodinâmicos em função da expansão do gás pós-liberação são mencionados, em especial o efeito Joule-Thomson. Durante uma expansão adiabática ocorre um resfriamento do gás à medida que se expande, e conforme este resfria-se tem-se uma tendência de aumento na extensão da pluma. No entanto, há uma observação no que diz respeito ao hidrogênio:

“O hidrogênio apresenta Efeito Joule-Thomson reverso, aquecendo à medida que se expande, e, portanto, nunca será mais pesado que o ar”. (IEC 60079-10-1, 2ª edição, 2015, página 21)

Fundamentalmente, este efeito é importante porque está ligado diretamente à natureza das forças intermoleculares entre as moléculas de gás. Se um gás real em condições de temperatura e pressão T_i e P_i se expande lentamente através de uma válvula ou superfície porosa, sem trocar calor com o ambiente, para uma condição T_f e P_f , conforme figura 4, observa-se uma variação na temperatura. Este fenômeno, conhecido como efeito Joule Thomson e relatado originalmente por Joule e Thomson (1852).

Figura 4 - Representações de sistemas de redução de pressão



Fonte: da autora

As seguintes considerações devem ser feitas para que o efeito Joule Thomson seja observado:

- A pressão no ponto i deve ser maior que no ponto f ; ($P_i > P_f$)
- Não há troca de calor com o ambiente; ($Q = 0$)
- Variações de energia potencial e cinética são desprezadas;
- Entalpia deve manter-se constante;

Ao aplicar as condições mencionadas acima à Primeira Lei da Termodinâmica é possível comprovar matematicamente que trata-se de um processo isentálpico, conforme equações abaixo.

$$\Delta U = Q + W \quad (4)$$

$$U_f - U_i = P_i V_i - P_f V_f \quad (5)$$

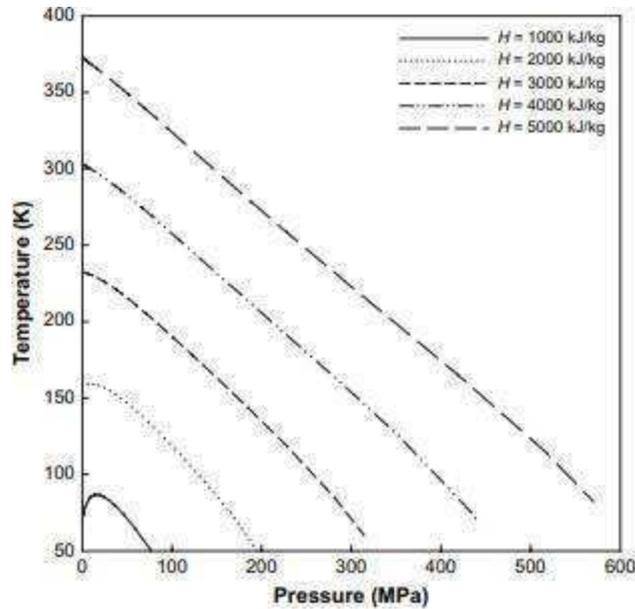
$$U_f + P_f V_f = U_i + P_i V_i \quad (6)$$

$$h_f = h_i \quad (7)$$

O coeficiente de Joule-Thomson é definido como a derivada da temperatura em função da pressão à entalpia constante (equação 8). Ele delimita os valores onde a derivada das curvas isentálpicas passam mudam de sinal, indicando que, na condição observada, durante o processo de expansão isentálpica ocorre um resfriamento ou aquecimento do gás, respectivamente. O gráfico da figura 5 apresenta algumas curvas isentálpicas para o gás hidrogênio.

$$\mu_{JT} = \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_H \quad (8)$$

Figura 5 - Curvas isentálpicas para o gás hidrogênio.



Fonte: (Ho,2009)

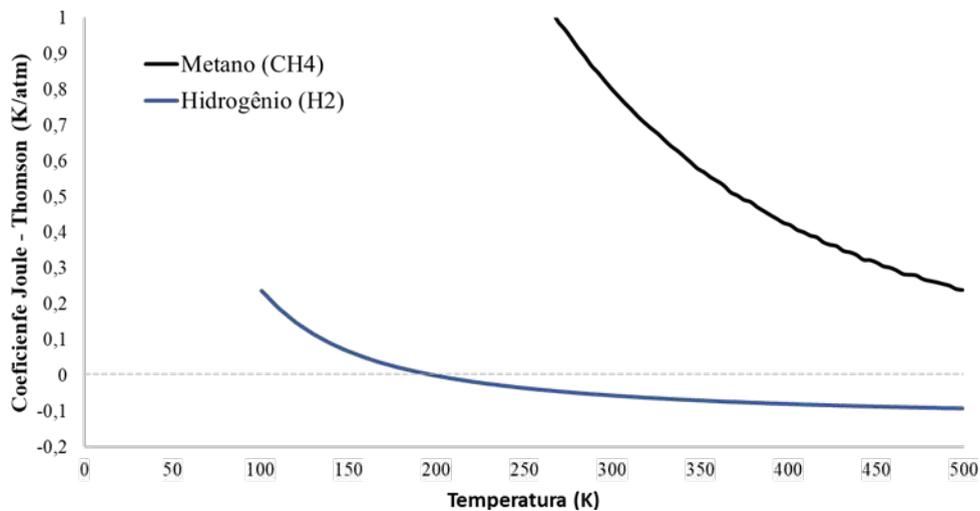
A curva de inversão de Joule Thomson, também conhecida como curva de inversão de temperatura, separa a região de valores positivos e negativos do coeficiente Joule Thomson. Ela é de extrema importância em processos de refrigeração e liquefação, pois o sinal do coeficiente de Joule-Thomson determina se a temperatura de um gás real aumenta ou diminui por expansão isentálpica (ABBAS, 2011)

Para valores positivos do coeficiente Joule-Thomson ocorre um resfriamento do gás (equação 9), o contrário também é verdade (equação 10). À temperatura ambiente, todos os gases, exceto hidrogênio, hélio e néon, esfriam após a expansão pelo processo de Joule Thomson (Castellan,1971). Conforme o gráfico da figura 6, que considera $P_{atm} = 1 atm$ e $T_{amb} = 300 K$ o coeficiente Joule Thomson possui valor negativo para o hidrogênio, o que resulta em aquecimento durante a expansão. Para o metano esse valor é positivo para as mesmas condições.

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_H > 0 \quad (9)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_H < 0 \quad (10)$$

Figura 6 - Curvas de inversão do coeficiente Joule Thomson à 1 atm.



Fonte: www.nist.gov

2.4 Aplicações do efeito Joule Thomson

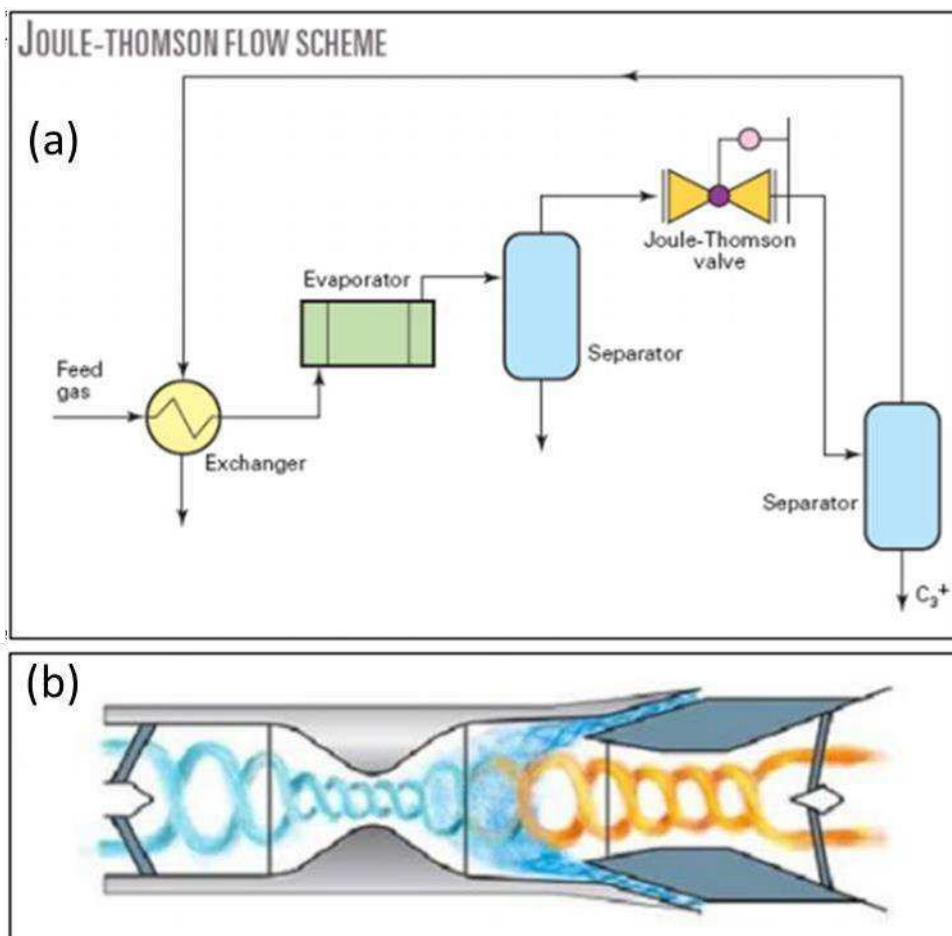
O processo conhecido como Joule Thomson é uma das técnicas mais importantes utilizadas na indústria e por este motivo vem sendo alvo de estudos há mais de um século, Love (1901) registrou o primeiro estudo à respeito do efeito.

Quando um gás real flui através de um redutor de fluxo ocorre uma queda de pressão considerável, essa queda de pressão é acompanhada por uma queda de temperatura devido ao efeito Joule Thomson, que a depender das condições de temperatura, pressão e propriedades físicas do fluido, podem resultar em aumento ou diminuição da eficiência em trocadores de calor. *Hwang e Jeong [5]* estudaram e descreveram que a queda de pressão Joule Thomson resulta em mudança no desempenho térmico de um trocador de calor.

O efeito Joule Thomson também é importante no processo de reabastecimento de um tanque de veículo movido à célula combustível. Por possuir coeficiente Joule Thomson negativo, o hidrogênio provoca um aumento na temperatura quando há uma redução de pressão. Neste caso, temperatura e pressão devem ser manipulados com o objetivo de tornar insignificante o aumento da temperatura do gás em comparação com a compressão do gás no tanque (Suryan,2012).

Outra aplicação importante é encontrada na indústria petroquímica, seu conceito é utilizado no processo de separação de vapor de água do gás natural, é possível observar o fluxograma do processo da figura 7a. O gás flui por uma válvula denominada de Joule Thomson onde ocorre uma redução na pressão e aumento na velocidade do fluxo, tal fenômeno resultará em uma queda repentina na temperatura, com isto, o vapor de água se condensa e cai como uma gota líquida, enquanto que os hidrocarbonetos seguem o fluxo normal, conforme figura 7b.

Figura 7 - Representações de sistemas de redução de pressão.



Fonte: (Ho,2019)

2.5 Fluidodinâmica computacional (CFD)

A possibilidade de prever consequências de uma explosão pode gerar projetos mais seguros (Cant *et al*, 2004). A aplicação de modelagem matemática e uso de CFD são questionadas por profissionais que não possuem a percepção de risco adequada nem a habilitação ou informação necessária para dimensionar as áreas de risco e assim, realizar uma classificação de áreas confiável (Rangel Jr *et al*, 2016).

A solução numérica fornecida pelo CFD é fornecida a partir de equações governantes, que são expressas em termos de equações diferenciais. As equações governantes representam as leis de conservação de massa, momento e energia para um fluxo não reativo. A solução numérica é calculada usando valores médios de propriedades físicas para cada volume de controle. O modelo matemático é expresso pelas equações (11) - (13) ANSYS (Ansys, 2015).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (11)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \otimes \mathbf{V}) = -\nabla P + \nabla \tau + \rho \mathbf{g} \quad (12)$$

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} h) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + r: \nabla \mathbf{V} \quad (13)$$

Onde ρ é a massa específica, t é o tempo, \mathbf{V} é o vetor velocidade da mistura, τ é a tensão de cisalhamento, \mathbf{g} é a gravidade, h é a entalpia e λ é a condutividade térmica.

O modelo de turbulência utilizado foi o shear stress transport (SST). O modelo SST faz uso de outros dois modelos de turbulência, o $k - \epsilon$ em regiões distantes das paredes e o $k - \omega$ próximo às paredes. Para simulações de jatos livres o modelo SST é recomendado como o mais adequado (Papanikolaou *et al.*, 2012).

Para fechar o sistema, as equações de transporte descritas acima devem ser acrescidas das equações de estado. Para um gás ideal, a densidade é calculada seguindo a lei do gás ideal e a capacidade calorífica (c_p) é uma função da

temperatura (equações 14 à 16).

$$\rho = \frac{wp_{abs}}{R_0T} \quad (14)$$

$$dh = c_p dT + \frac{dp}{\rho} \quad (15)$$

$$c_p = c_p(T) \quad (16)$$

A simulação da condição de não idealidade do gás exige um modelo termodinâmico mais robusto, neste trabalho o modelo Soave Redlich Kwong foi utilizado (equações 17 à 21).

$$p = \frac{RT}{v - b + c} - \frac{a(T)}{v(v + b)} \quad (17)$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c} \quad (18)$$

$$a(T) = a_0 \left(1 + n \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right)^2 \quad (19)$$

$$a_0 = 0.42747 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \quad (20)$$

$$n = 0.480 + 1.574\omega - 0.176\omega^2 \quad (21)$$

Onde R é a constante universal dos gases, T é a temperatura, T_c é a temperatura crítica, P_c é a pressão crítica e ω é o fator acêntrico.

Alves (2019) utilizou técnicas de CFD para investigar a extensão da área de risco em instalações industriais onde gases explosivos são utilizados, ele observou para os gases metano, hidrogênio e etileno os modelos analíticos superestimam esse valor.

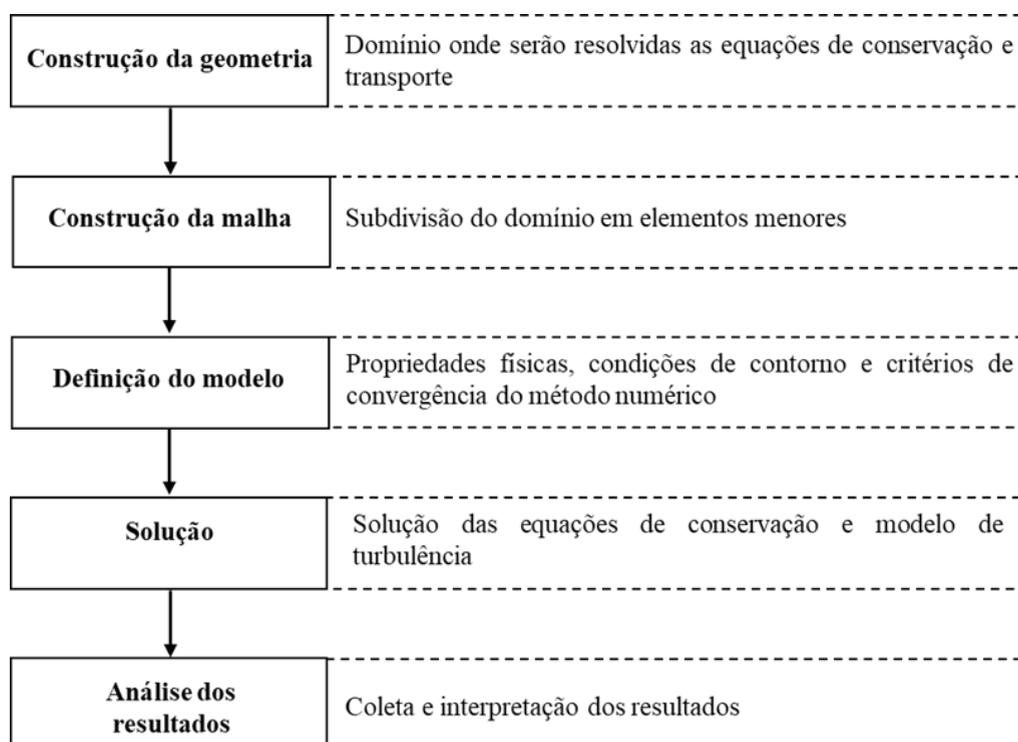
CAPÍTULO 3

3. METODOLOGIA

3.1 Simulações em CFD de liberação de jatos de gases inflamáveis

As simulações do fenômeno de liberação gasosa sob alta pressão foram realizadas no *software Ansys CFX 16.1®* de acordo com sua metodologia padrão, descrita na figura 8

Figura 8 - Etapas de simulação

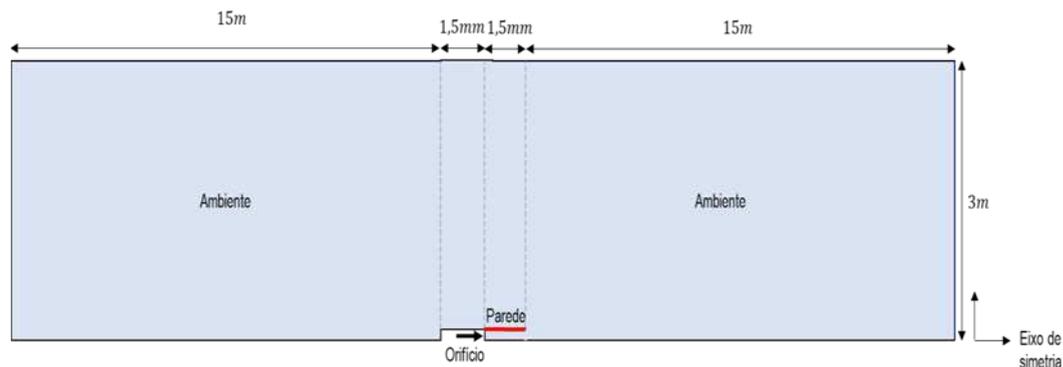


3.2 Simulação em CFD de liberação de jatos de gases inflamáveis sem influência da gravidade

3.2.1 Geometria

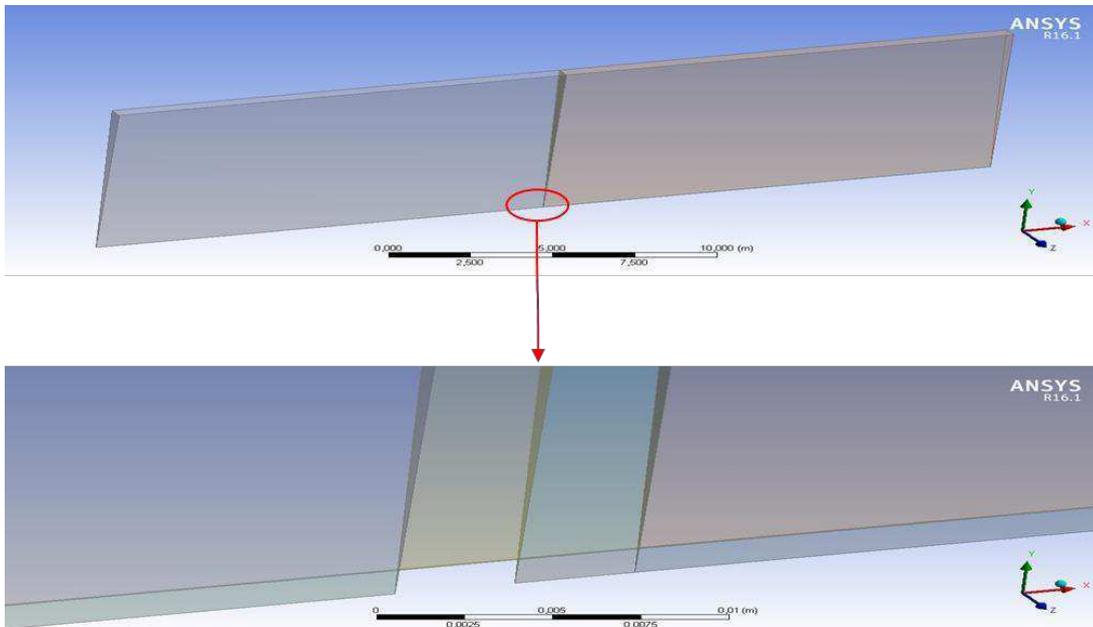
Inicialmente, utilizando o *Design Modeller*[®] presente no pacote ANSYS[®] 16.1 foi definido o domínio computacional simétrico cujas dimensões seguem descritas na figura 9. É importante observar que a construção do domínio foi feita de tal forma que permitisse maior refino na região próxima ao orifício, onde ocorre a expansão de interesse de estudo deste trabalho.

Figura 9 - Esboço do domínio computacional para simulação de jatos de gases inflamáveis



O domínio aproxima-se de uma geometria bidimensional através de uma fatia de 4° em torno do eixo de simetria, conforme a figura 10. Esta aproximação se dá a partir da consideração que a pluma gasosa se forma simetricamente após a liberação, desconsiderando os efeitos de gravidade. Torna-se uma consideração extremamente importante para redução do número de elementos a serem utilizados na resolução das equações de conservação, transporte e modelo de turbulência. Para avaliar a emissão de gás a partir de um ponto de vazamento de 2,5mm de diâmetro, definiu-se a dimensão do orifício na geometria como 1,25mm devido à consideração de simetria em torno do eixo de liberação.

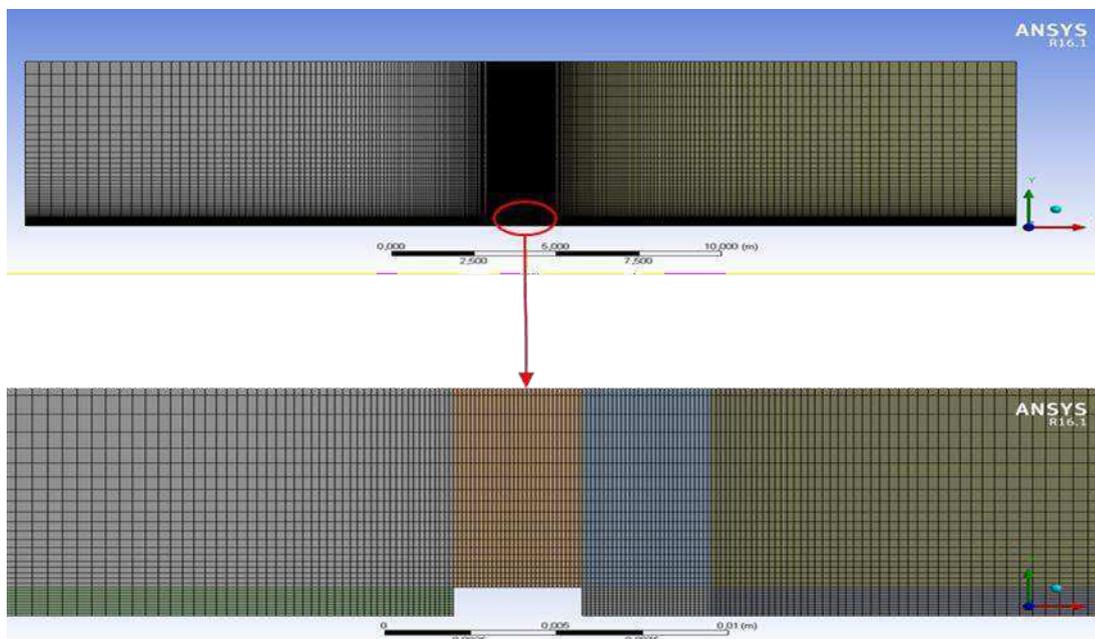
Figura 10 - Geometria construída para a simulação de jatos de gases inflamáveis



3.2.2 Malha

Em seguida, foi construída uma malha estruturada composta por 72300 elementos e 145530 nós, com maior grau de refinamento na região de interesse observação do fenômeno, próximo ao orifício de liberação. À elementos mais distantes da região do orifício atribuiu-se um menor refino, com o objetivo de reduzir o esforço computacional na resolução do problema. A figura 11 demonstra através de uma visão bidimensional como a malha foi construída.

Figura 11 - Malha computacional da simulação de jatos de gases inflamáveis



Três malhas semelhantes com diferentes números de elementos foram construídas com o objetivo de encontrar a melhor configuração de malha para os casos estudados. O caso base utilizado consiste em um vazamento de gás hidrogênio em condição de idealidade, cuja temperatura e pressão de armazenamento são iguais a 300 K e 50 bar, respectivamente. A extensão da pluma formada em concentração igual ao limite inferior de inflamabilidade (LEL) e meio LEL do gás hidrogênio foi utilizada como critério de avaliação. Os critérios de convergência estabelecidos para as simulações em questão foram uma tolerância de 1e-05 para os resíduos RMS e de 0,01 para os *imbalances*

Tabela 4 - Estudo de dependência de malha

Especificações das malhas			
Mesh/Informação da simulação	Caso 1	Caso 2	Caso 3
Elementos	72300	121300	180300
Nós	145530	243730	361930
Número de iterações	1748	1745	1721
Tempo de simulação	32min:20.628 s	3h:19min	5h:10min
Atingiu os critérios de convergência?	Sim	Sim	Sim
Extensão no LEL (mol/mol)	4.5916 m	4.5920 m	4.5922
Extensão em 1/2 LEL (mol/mol)	9.24087 m	9.23777	9.2373

Observando os resultados da tabela acima é possível concluir que a extensão não apresenta uma variação significativa quanto maior for o número de elementos da malha, pode-se verificar ainda que o tempo necessário para que a simulação atenda aos critérios de convergência é significativamente menor para o caso 1 em relação aos casos 2 e 3. Conclui-se, portanto, que a configuração de malha 1 demonstrou-se eficiente para os objetivos deste trabalho.

3.2.3 Modelo

As condições de contorno foram adicionadas ao domínio no *software ANSYS CFX® 16.1* conforme representado na figura 12 e descrito na tabela 5 abaixo.

Figura 12 - Definição de condições de contorno

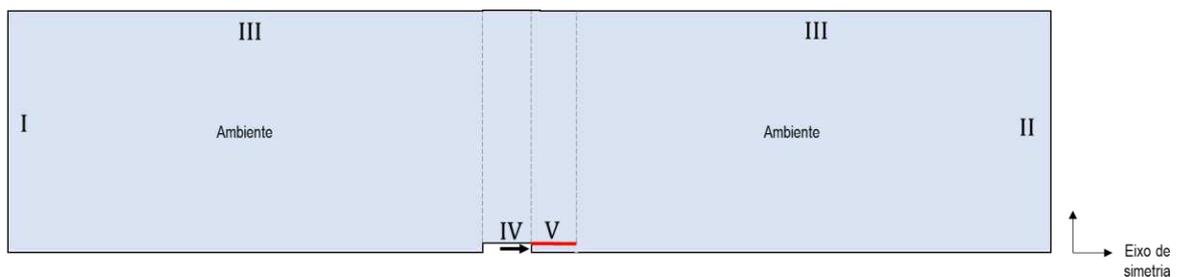


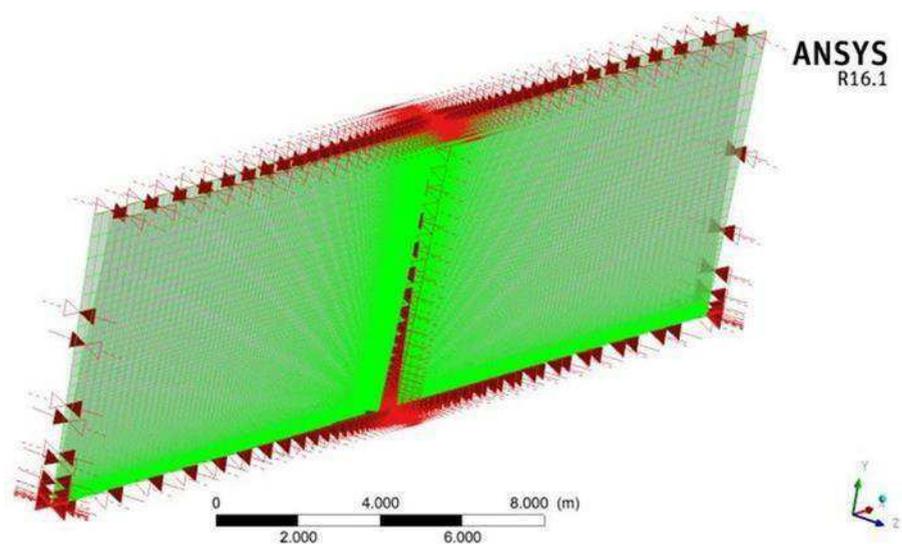
Tabela 5 - Condições de contorno

Localização	Setup
I	<i>Opening</i>
II	<i>Opening</i>
III	<i>Opening</i>
IV	<i>Inlet</i>
V	<i>Wall</i>

4. *Opening*: Contorno cujas especificações referem-se às condições do ambiente onde ocorre o vazamento do gás. Para os casos simulados foi considerado pressão e temperatura ambientes iguais a 1 atm e 300 K, respectivamente.

- **Inlet:** Corresponde a região do domínio computacional onde ocorre o vazamento do gás ao ambiente. As condições de pressão e temperatura de armazenamento são inseridas para determinação de pressão, velocidade e temperatura no contorno utilizando as equações 1, 2 e 3.
- **Wall:** Corresponde a delimitação física entre o orifício e o ambiente. O tipo de contorno especificado no *software* é do tipo parede com condição de não deslizamento, adiabática e sem rugosidade.
- **Symmetry:** O contorno do tipo Symmetry foi aplicado nos planos simétricos à geometria e ao escoamento, conforme figura 13.

Figura 13 - Contorno de simetria definido no modelo



Os materiais foram definidos como uma mistura de ar em condição de idealidade nitrogênio e oxigênio cujas composições são de 0,79 e 0,21, respectivamente, e os gases utilizados como objeto de estudo deste trabalho, hidrogênio e metano também em condição de idealidade. Para as simulações em condição de não idealidade foi utilizado o modelo termodinâmico Soave Redlich Kwong (SRK)

O modelo de turbulência do transporte de tensão de cisalhamento (SST), é usado aqui. O modelo SST usa o modelo $k - \omega$ em regiões próximas da superfície, e o modelo $k - \varepsilon$ é usado em regiões distantes às paredes. O modelo de turbulência SST é conhecido por ser adequado para modelar turbulência de jato livre (Papanikolaou et al., 2012). Os critérios de convergência foram de 1e-05 para o RMS e de 0.01 para os *imbalances*.

As condições de temperatura, pressão e propriedades dos gases estudados seguem descritos na tabela 6 abaixo.

Tabela 6 - Casos simulados sem a influência da gravidade

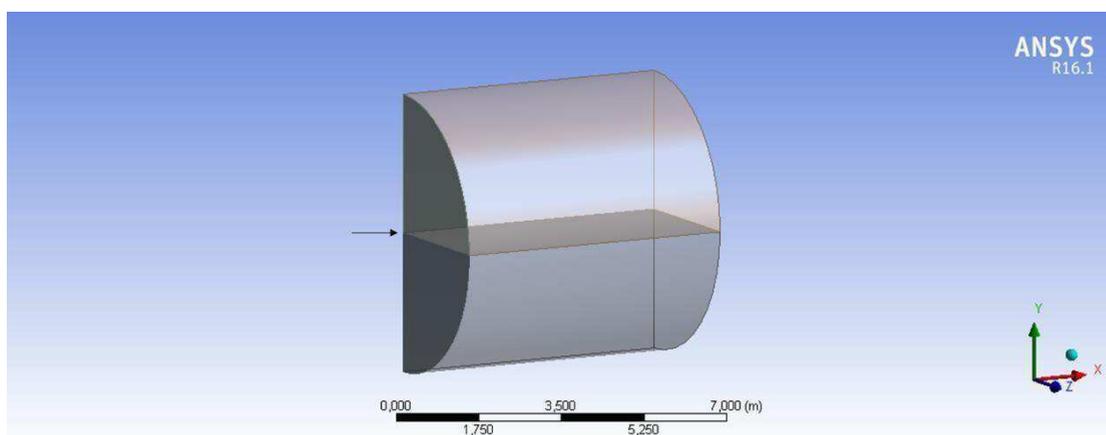
CASOS	GÁS	CONDIÇÃO DE IDEALIDADE	<i>T</i>vaz(K)	<i>P</i>vaz (bar)
1	Hidrogênio	Sim	300	50
2		Não	300	50
3	Metano	Sim	300	50
4		Não	300	50
5	Hidrogênio	Sim	300	40
6		Não	300	40
7	Metano	Sim	300	40
8		Não	300	40
9	Hidrogênio	Sim	300	30
10		Não	300	30
11	Metano	Sim	300	30
12		Não	300	30
13	Hidrogênio	Sim	300	20
14		Não	300	20
15	Metano	Sim	300	20
16		Não	300	20
17	Hidrogênio	Sim	300	10
18		Não	300	10
19	Metano	Sim	300	10
20		Não	300	10

3.3 Simulação em CFD de liberação de jatos de gases inflamáveis com influência da Gravidade

3.3.1 Geometria

As dimensões utilizadas para o domínio foram as mesmas descritas na figura 9, por sua vez um domínio tridimensional foi utilizado através de uma fatia de 180° em torno do eixo de simetria. Esta configuração foi pensada com o objetivo de avaliar a influência da gravidade nas liberações gasosas estudadas neste trabalho. A geometria utilizada segue ilustrada na figura 14.

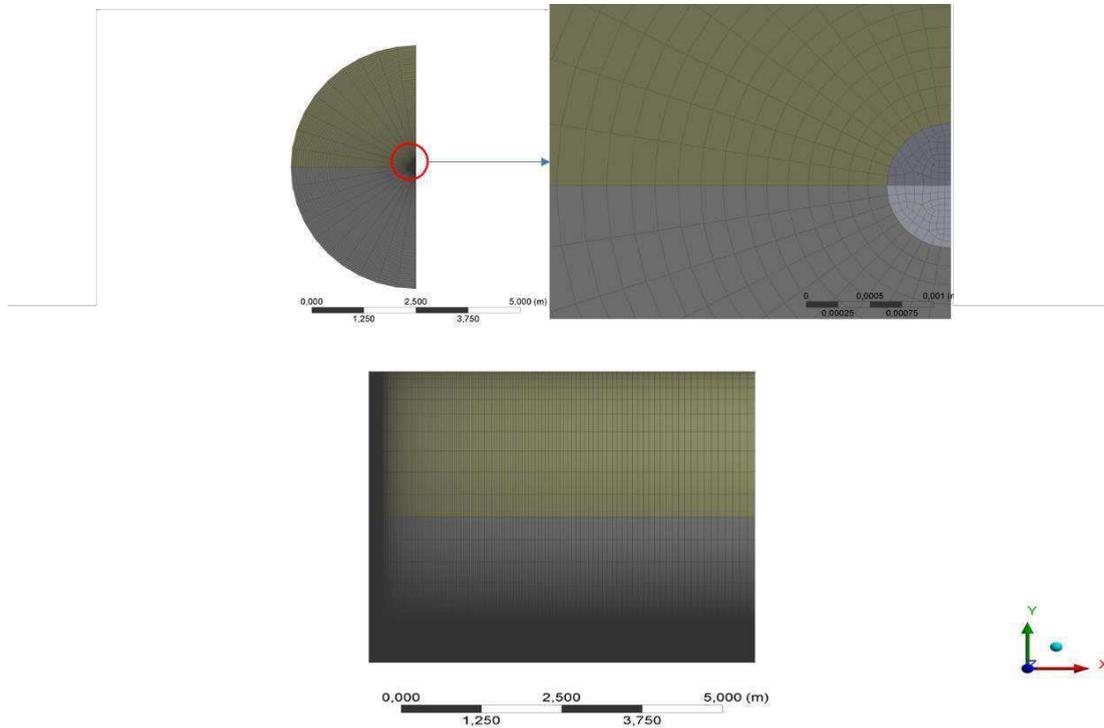
Figura 14 - Domínio computacional da simulação de jatos de gases inflamáveis com influência da gravidade



3.3.2 Malha

Em seguida, foi construída uma malha semi estruturada composta por 1952860 elementos e 2062007 nós, com maior grau de refinamento na região de interesse observação do fenômeno, próximo ao orifício de liberação. A figura 15 demonstra através de uma visão bidimensional como a malha foi construída.

Figura 15 - Malha computacional da simulação de jatos de gases inflamáveis com influência da gravidade



3.3.1 Modelo

O modelo utilizado foi o mesmo descrito no tópico 3.2.3 deste trabalho. As condições de temperatura, pressão e propriedades dos gases estudados seguem descritos na tabela 7. Assumiu-se ainda uma gravidade de $-9,81 \text{ m/s}$ no eixo y.

Tabela 7 - Casos simulados com a influência da gravidade

CASOS	GÁS	CONDIÇÃO DE IDEALIDADE	$T_{vaz}(K)$	$P_{vaz} (bar)$
1	Hidrogênio	Sim	300	50
2		Não	300	50
3	Metano	Sim	300	50
4		Não	300	50

CAPÍTULO 4

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 Liberações de jatos inflamáveis para classificação de áreas

4.1.1 Previsão da formação de barril na região de expansão

O caso 1 cujas condições estão definidas na tabela 6 foi utilizado para avaliar o comportamento do gás imediatamente após o orifício, onde pode-se perceber a formação característica do barril (figura 16). Observa-se que a queda de pressão provoca um aumento da velocidade e redução da temperatura (figura 17) do jato. Por se tratar de uma expansão adiabática, e, portanto, que não troca calor com o meio, toda energia perdida pelo gás na forma de calor é convertida em energia cinética.

Figura 16 - Campo de velocidade no barril (Número de Mach) para o vazamento de hidrogênio ideal a 50 bar, 300K e diâmetro de orifício de 2,5 mm

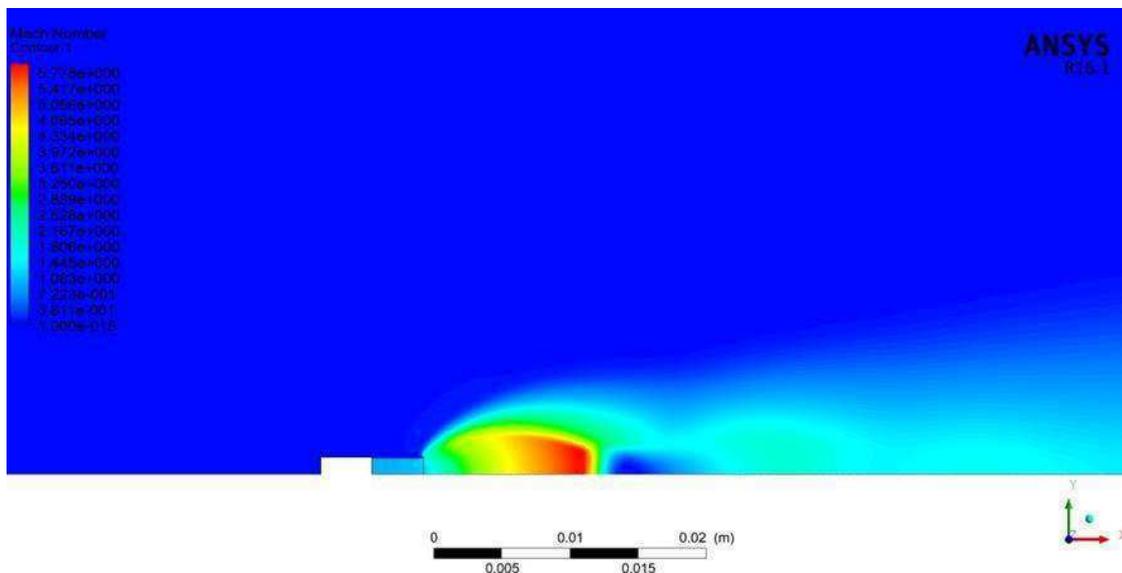
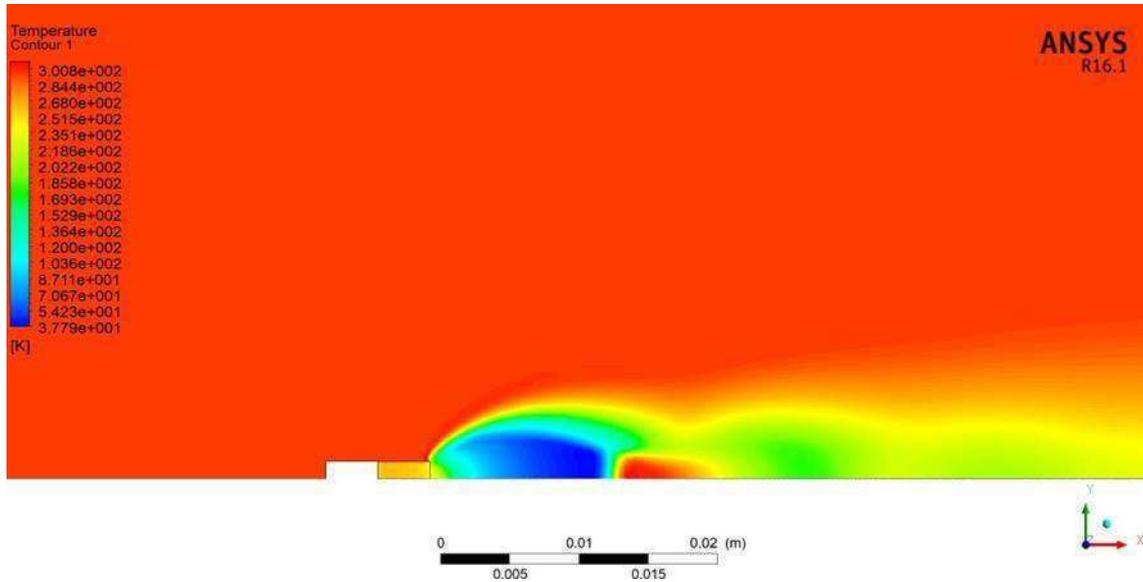


Figura 17 - Campo Temperatura no barril para o vazamento de hidrogênio ideal a 50 bar, 300K e diâmetro de orifício de 2,5 mm



4.1.2 Análise da influência da idealidade e não-idealidade dos gases no perfil de temperatura ao longo do eixo de liberação

Os perfis de temperatura ao longo do vazamento (figuras 18 à 22), obtidos através das simulações em CFD para os gases hidrogênio e metano em diferentes pressões de armazenamento demonstram uma ligeira redução para o gás com propriedades reais se comparada ao ideal, evidenciando um pequeno desvio de temperatura devido a não idealidade do gás. No entanto, é importante observar que há uma queda na temperatura do hidrogênio durante a expansão, comportamento este que, segundo a norma internacional IEC, não é esperado.

Figura 18 - Perfis de temperatura ao longo da extensão do vazamento para os gases Hidrogênio e metano ideal e real a 50 bar, 300 K e diâmetro de orifício de 2,5 mm

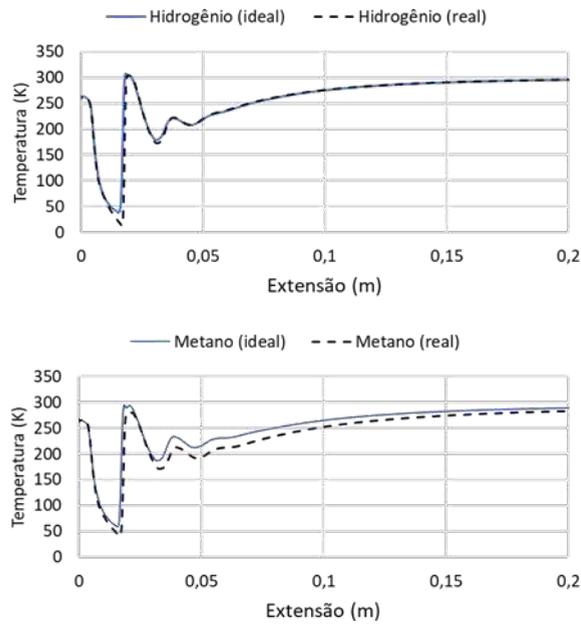


Figura 19 - Perfis de temperatura ao longo da extensão do vazamento para os gases Hidrogênio e metano ideal e real a 40 bar, 300 K e diâmetro de orifício de 2,5 mm

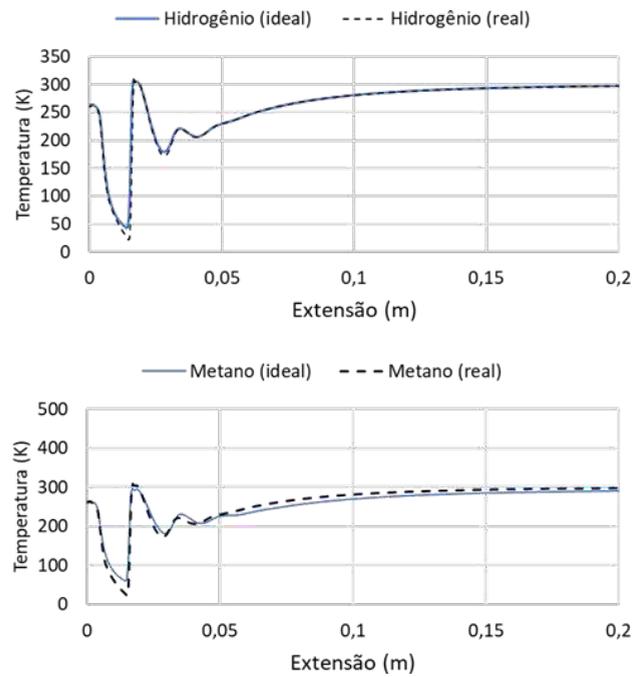


Figura 20 -- Perfis de temperatura ao longo da extensão do vazamento para os gases Hidrogênio e metano ideal e real a 30 bar, 300 K e diâmetro de orifício de 2,5 m

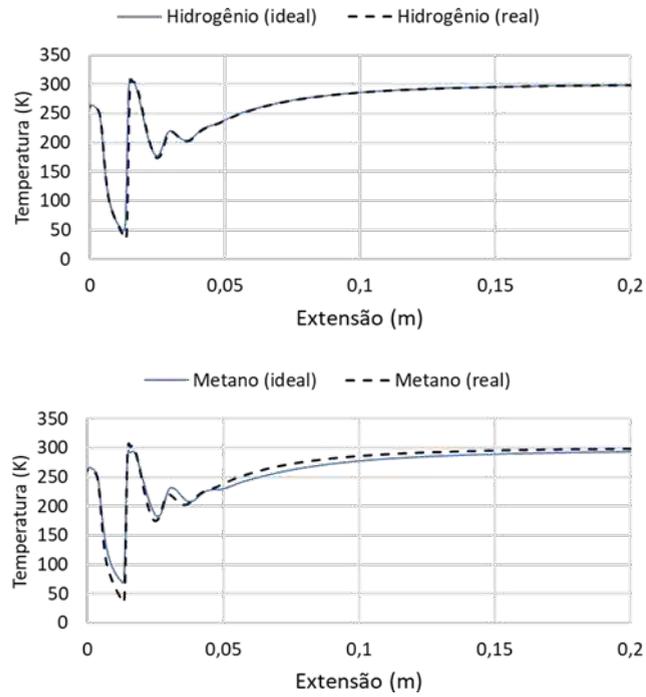


Figura 21 - Perfis de temperatura ao longo da extensão do vazamento para os gases Hidrogênio e metano ideal e real a 20 bar, 300 K e diâmetro de orifício de 2,5 mm

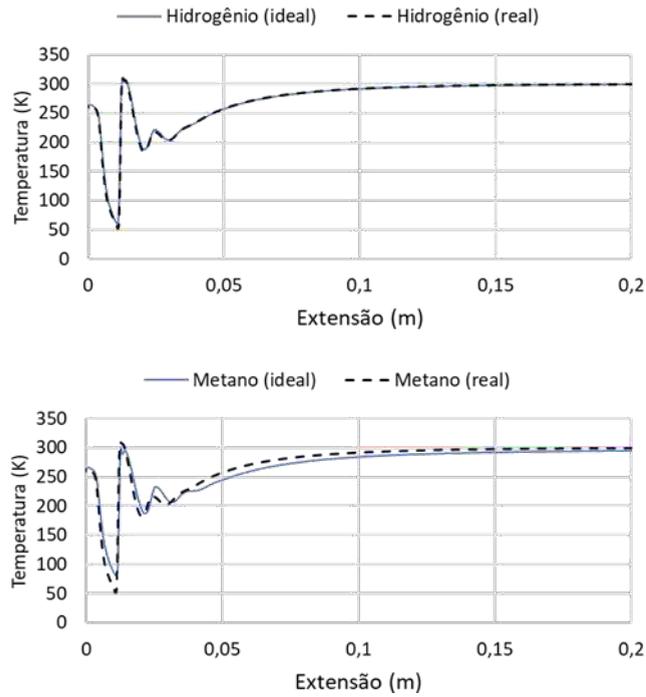
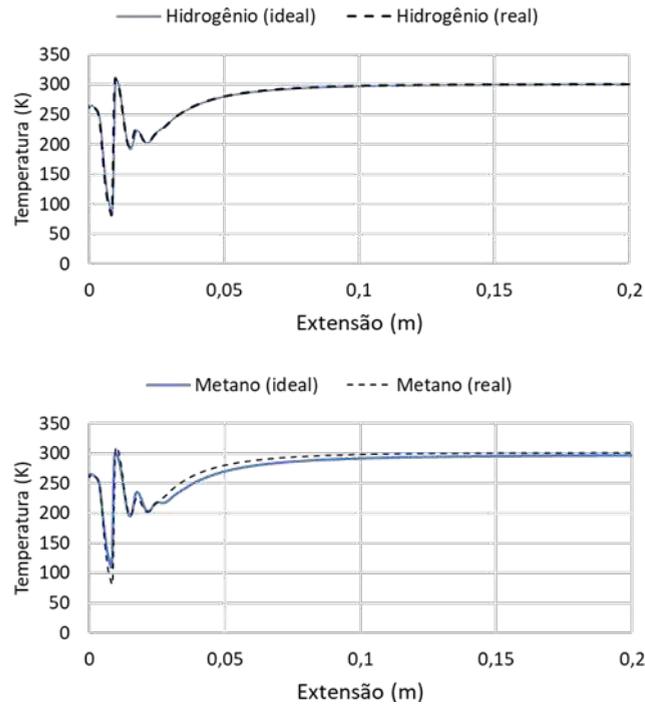


Figura 22 - Perfis de temperatura ao longo da extensão do vazamento para os gases Hidrogênio e metano ideal e real a 10 bar, 300 K e diâmetro de orifício de 2,5 mm



É possível observar que conforme a pressão de armazenamento diminui, esta variação de temperatura é reduzida, apresentando uma variação máxima de 12,5 K para o hidrogênio e 39 K para o metano, ambos armazenados a uma pressão de 40 bar. Os resultados mostraram ainda que o gás hidrogênio em condição de não idealidade possui a menor contribuição na variação de temperatura durante a expansão quando armazenado a uma pressão de 10 bar, evidenciando assim que, para este tipo de expansão, mesmo que em pressões mais baixas o hidrogênio tem comportamento parecido com a idealidade, não sendo assim possível observar o efeito Joule Thomson reverso citado na norma internacional IEC.

4.1.3 Análise da influência da pressão de armazenamento dos gases no perfil de temperatura ao longo do eixo de liberação

A partir da análise dos resultados de extensão em LEL e em $\frac{1}{2}$ LEL dos casos simulados (tabela 6) apresentados na tabela 8 abaixo, percebe-se que vazamentos

de gás hidrogênio resultam em áreas perigosas com maior extensão que vazamentos de gás metano, tal conclusão justifica-se intuitivamente pelo fato de o hidrogênio ser um gás mais leve, e portanto, que se arrasta muito mais facilmente.

No tocante à idealidade e não idealidade dos gases é possível verificar uma redução máxima de 6 cm para o gás hidrogênio em condição não ideal se comparado com o gás ideal em condições de armazenamento de 300 K e 50 bar. Tal variação é reduzida conforme menor a pressão de armazenamento, evidenciando mais uma vez o comportamento aproximado da idealidade a baixas pressões. O comportamento contrário é observado para o metano, a não idealidade do gás aumenta a extensão devido ao maior resfriamento durante a expansão, comportamento este que é esperado devido à contribuição do efeito Joule-Thomson.

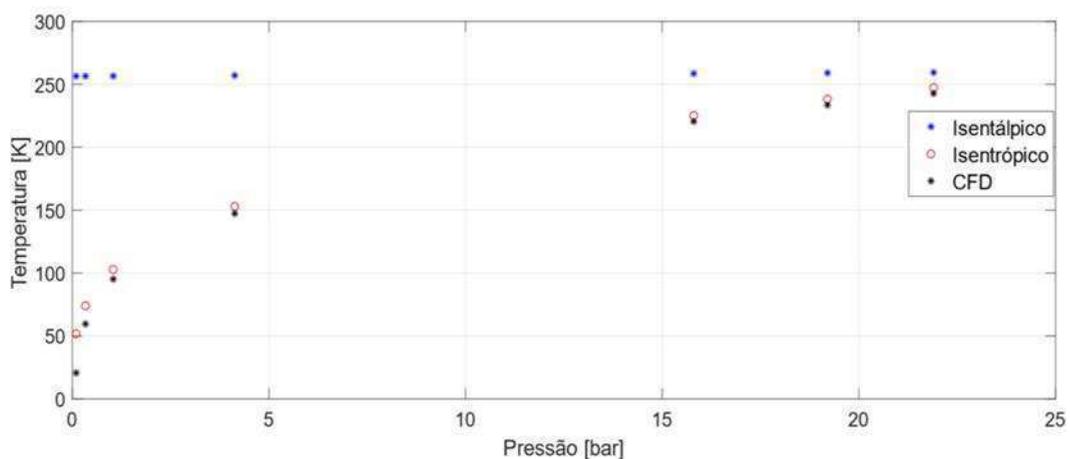
Tabela 8 - Resultados de extensão dos casos simulados sem a influência da gravidade

CASOS	$T_{vaz}(K)$	$P_{vaz}(bar)$	Extensão (LEL)	Extensão ($\frac{1}{2} LEL$)
1	300	50	4,59	9,24
2	300	50	4,53	9,11
3	300	50	1,31	2,63
4	300	50	1,38	2,77
5	300	40	4,12	8,29
6	300	40	4,07	8,19
7	300	40	1,54	3,03
8	300	40	3,24	4,30
9	300	30	3,58	7,20
10	300	30	3,54	7,13
11	300	30	1,33	2,63
12	300	30	2,83	5,96
13	300	20	2,94	5,92
14	300	20	2,92	5,87
15	300	20	1,09	2,15
16	300	20	2,33	4,69
17	300	10	2,13	4,28
18	300	10	2,12	4,25
19	300	10	0,58	1,17
20	300	10	1,69	3,40

4.1.4 Estudo do tipo de expansão

A partir de alguns pontos de pressão e temperatura durante a expansão obtidos através da simulação do caso 2 em CFD, foi possível construir o gráfico da Figura 23. É possível observar que para as condições de vazamento avaliadas, o modelo em CFD demonstra maior aproximação de uma expansão isentrópica. Demonstrando que para este tipo de liberação o hidrogênio irá se comportar como os demais gases, resultando em um resfriamento, em contradição com o que é descrito na norma internacional IEC

Figura 23 - Análise dos tipos de expansão para o gás hidrogênio



4.1.5 Estudo da influência da gravidade na extensão da área perigosa

Com o objetivo de avaliar a influência da densidade do gás ao longo da liberação, algumas simulações foram feitas em uma geometria tridimensional com presença do efeito de gravidade. Foi possível verificar que o gás hidrogênio, por ser mais leve que o ar, possui tendência a subir, o metano considerado um gás neutro tende a permanecer rente ao eixo de liberação. Comparando os modelos utilizando gás ideal e real, pôde-se observar que a extensão diminui ligeiramente para o hidrogênio em condição de não idealidade, evidenciando uma influência mínima na extensão da pluma inflamável, tal comportamento é justificável devido a tendência do hidrogênio

em subir, reduzindo assim a extensão no eixo de liberação. Diferentemente do hidrogênio, para o metano esta extensão aumenta superficialmente.

Figura 24 - Influência da gravidade na extensão da área perigosa - Hidrogênio (gás ideal)

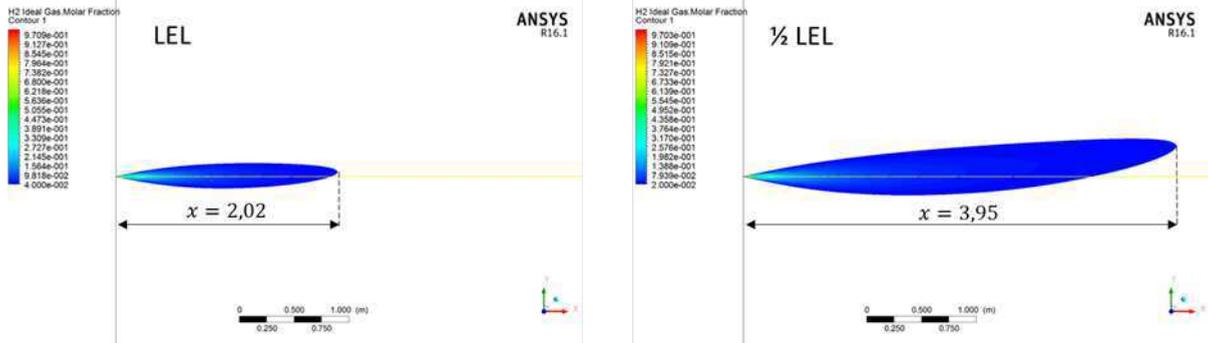


Figura 25 - Influência da gravidade na extensão da área perigosa - Hidrogênio (gás real)

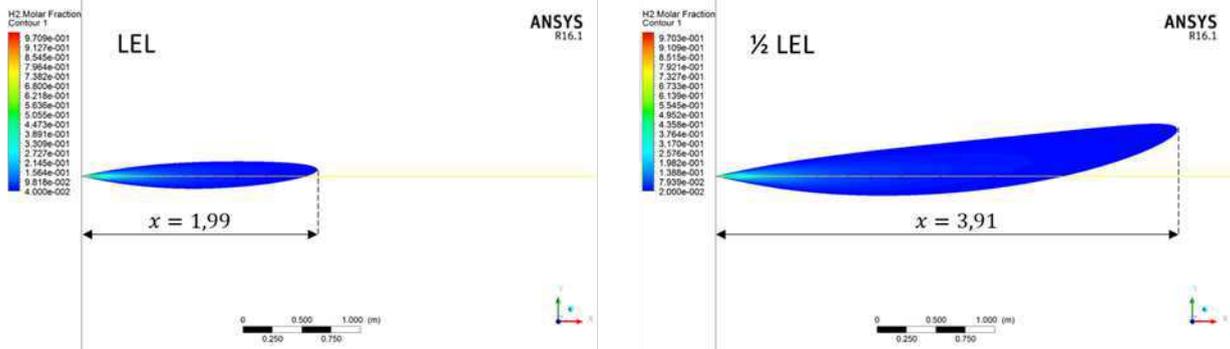


Figura 26 - Influência da gravidade na extensão da área perigosa - Metano (gás ideal)

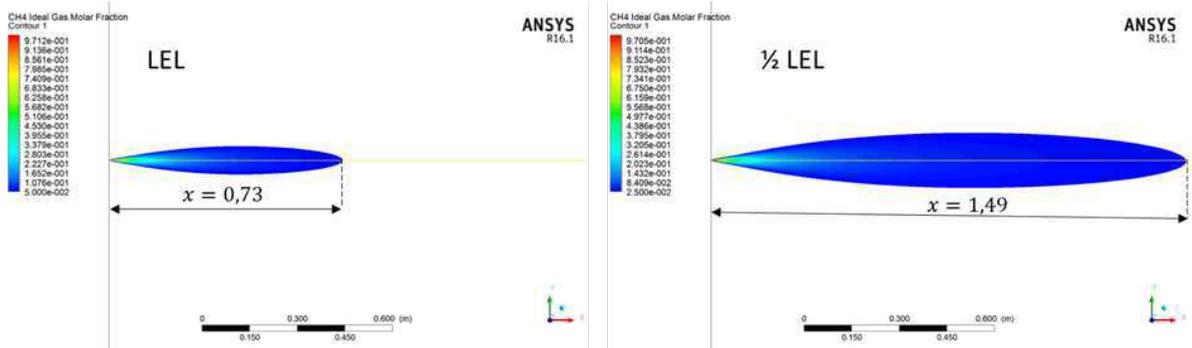
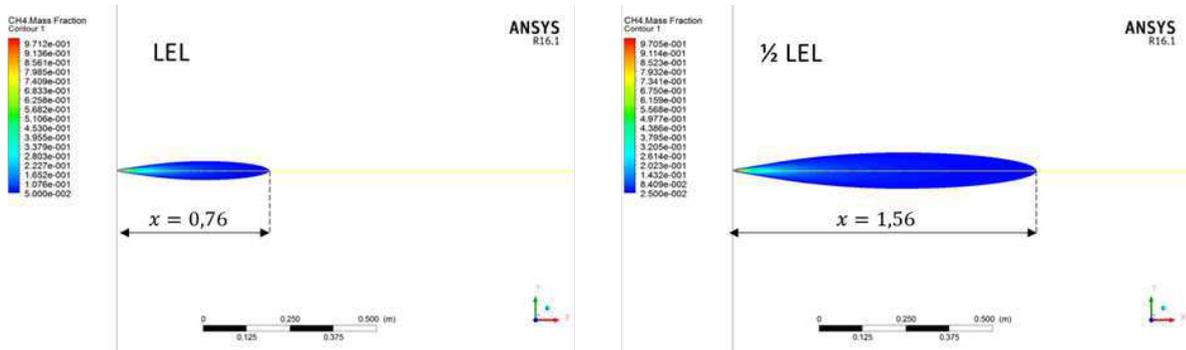


Figura 27 - Influência da gravidade na extensão da área perigosa - Metano (gás real)



CAPÍTULO 5

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

A partir dos resultados obtidos neste estudo, foi possível concluir que o efeito Joule Thomson não exerce influência significativa em liberações gasosas de alta pressão, visto que alcançam velocidades elevadas, e por este motivo, torna-se infactível desconsiderar a energia cinética para aproximá-la de uma expansão isentálpica. Os resultados mostraram discordância com o texto da norma internacional IEC que afirma que para o gás hidrogênio ocorre um aquecimento durante a expansão.

Os casos simulados dos gases hidrogênio e metano em diferentes pressões de armazenamento demonstraram uma redução para o gás com propriedades reais se comparado ao ideal, evidenciando um pequeno desvio de temperatura devido a não idealidade do gás. Foi possível observar que conforme a pressão de armazenamento diminui, esta variação de temperatura é reduzida, para este tipo de expansão, mesmo que em pressões mais baixas, o hidrogênio tem comportamento parecido com a idealidade, não sendo assim possível observar o efeito Joule Thomson reverso.

Referências Bibliográficas

ABBAS, Rima et al. Joule–Thomson coefficients and Joule–Thomson inversion curves for pure compounds and binary systems predicted with the group contribution equation of state VTPR. *Fluid phase equilibria*, v. 306, n. 2, p. 181-189, 2011.

Aceves SM, Espinosa-Loza F, Ledesma-Orozco E, Ross TO, Weisberg AH, Brunner TC, et al. High-density automotive hydrogen storage with cryogenic capable pressure vessels. *Int J Hydrogen Energy* 2010.

ALVES, José JN et al. Overview and experimental verification of models to classify hazardous areas. *Process Safety and Environmental Protection*, v. 122, p. 102-117, 2019.

ANSYS Inc., *ANSYS CFX-Solver Theory Guide, Release 16.1*, Canonsburg, United States, 2015.

BENINTENDI, R. *Process safety calculations*. Elsevier, 2018

Benintendi, R., 2010. Turbulent jet modelling for hazardous area classification. *J. LossPrev. Process Ind.* 23, 373–378.

Bulgarelli, R., 2009. Instalações Elétricas e de Instrumentação para Áreas Classificadas. Requisitos para automação de projetos e para estudos de classificação de áreas. Revista o Setor Elétrico.

J.P. Joule, W. Thomson, *Philos. Mag.* 4 (1852) 481.

Cant, R., Dawes, W., & Savill, A. (2004). *Advanced Cfd And Modeling Of Ac*

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;

E. Love, Reviews—The Joule-Thompson Thermal Effect: Its Connection with the Characteristic Equation and Some of Its Thermodynamical Consequences, *J. Phys. Chem.*, (1901)

Energy institute. Predictions of minimum spark ignition energy and quenching distances for CH₄/H₂ and C₃H₈/H₂ mixtures with air. 2002.

Ewan, B.C.R., Moodie, K., 1986. Structure and velocity measurements in under-expanded jets. Combust. Sci. Technol. 45, 275–288.

FOX, Robert W.; MCDONALD, Alan T. *Introdução à mecânica dos fluidos*. 5 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2001.

HO, Chia Ming. *Modeling Simulation of Supersonic Gas Dehydration using Joule Thomson Valve*. 2009.

HWANG, Gyuwan; JEONG, Sangkwon. Pressure loss effect on recuperative heat exchanger and its thermal performance. *Cryogenics*, v. 50, n. 1, p. 13-17, 2010.

IEC 60079-10-1/Ed2, 2015. *Explosive atmospheres – Part 10-1: Classification of areas*

– *Explosive gas atmosphere.*

LEES, F.P. Loss Prevention in the Process Industries - Hazard Identification, Assessment and Control. 4rd edition, Butterworth-Heinemann, Oxford, UK, 2012. NIST Chemistry WebBook. Disponível em: < <https://webbook.nist.gov/chemistry//>>. Acesso em: 07 de agosto de 2020.

Love, E. Reviews The Joule-Thompson Thermal Effect: Its Connection with the Characteristic Equation and Some of Its Thermodynamical Consequences. J. Phys. Chem. 1901, 5, 75–75

Papanikolaou, E., Baraldi, D., Kuznetsov, M., Venetsanos, A., 2012. Evaluation of notional nozzle approaches for CFD simulations of free-shear under-expanded hydrogen jets. Int. J. Hydrogen Energy 37, 18563–18574

Rangel Jr., E., Luiz, A. M., & Filho, H. L. (JAN/FEB de 2016). Performing reliable hazardous-area-classification studies. IEEE Industry Applications Magazine, pp. 28-39.

Suryan A, Kim H, Setoguchi T. Three dimensional numerical computations on the fast filling of a hydrogen tank under different conditions. Int J Hydrogen Energy 2012.

WARK, Kenneth. *Advanced thermodynamics for engineers*. New York: McGraw-Hill, 1995.

ZHANG, Jibao et al. Isentropic analysis and numerical investigation on high-pressure hydrogen jets with real gas effects. International Journal of Hydrogen Energy, 2020.

