



JULIANE FIATES

**DESENVOLVIMENTO DE UMA METODOLOGIA PARA
SIMULAÇÃO DE DISPERSÃO DE GÁS INFLAMÁVEL
POR MEIO DE CFD UTILIZANDO OPENFOAM**

CAMPINAS

2015



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
Faculdade de Engenharia Química

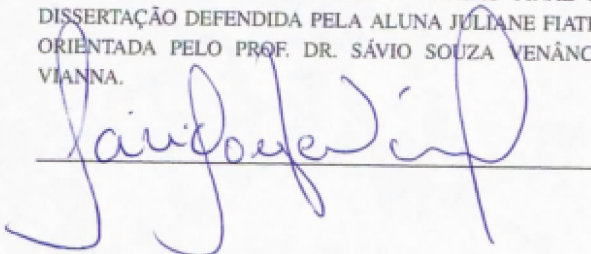
JULIANE FIATES

**DESENVOLVIMENTO DE UMA METODOLOGIA PARA SIMULAÇÃO DE
DISPERSÃO DE GÁS INFLAMÁVEL POR MEIO DE CFD UTILIZANDO
OPENFOAM**

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestra em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. SÁVIO SOUZA VENÂNCIO VIANNA

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELA ALUNA JULIANE FIATES, ORIENTADA PELO PROF. DR. SÁVIO SOUZA VENÂNCIO VIANNA.



CAMPINAS

2015

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura
Elizangela Aparecida dos Santos Souza - CRB 8/8098

F442d Fiates, Juliane, 1989-
Desenvolvimento de uma metodologia para simulação de dispersão de gás inflamável por meio de CFD utilizando OpenFOAM / Juliane Fiates. – Campinas, SP : [s.n.], 2015.

Orientador: Sávio Souza Venâncio Vianna.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Gerenciamento de risco. 2. Gás - Vazamento. 3. Fluidodinâmica computacional (CFD). I. Vianna, Sávio Souza Venâncio, 1975-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Development of methodology for flammable gas dispersion simulation by CFD using OpenFOAM

Palavras-chave em inglês:

Risk management

Gas - Leak

Computational fluid dynamics (CFD)

Área de concentração: Sistemas de Processos Químicos e Informática

Titulação: Mestra em Engenharia Química

Banca examinadora:

Sávio Souza Venâncio Vianna [Orientador]

Gustavo Doubek

Rogério Gonçalves dos Santos

Data de defesa: 24-07-2015

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE SISTEMAS QUÍMICOS

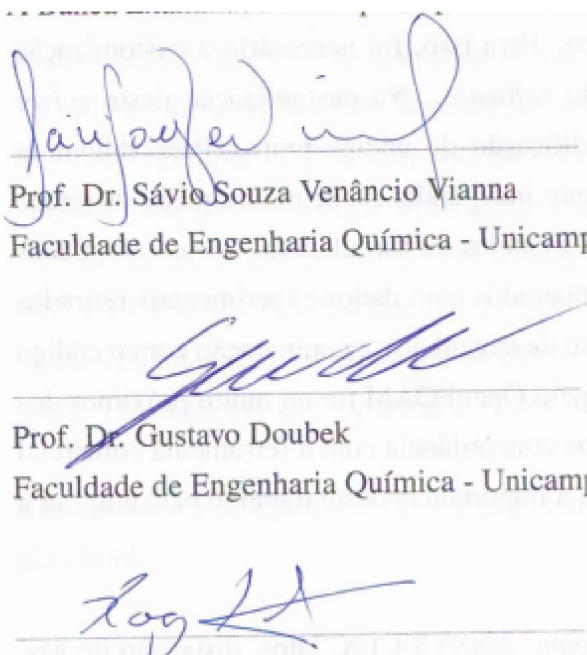
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Desenvolvimento de uma Metodologia para Simulação de Dispersão de Gás Inflamável
por meio de CFD Utilizando OpenFOAM**

Autora: Juliane Fiates

Orientador: Prof. Dr. Sávio Souza Venâncio Vianna

A Banca Examinadora composta pelos membros abaixo aprovou esta Dissertação:



Prof. Dr. Sávio Souza Venâncio Vianna
Faculdade de Engenharia Química - Unicamp

Prof. Dr. Gustavo Doubek
Faculdade de Engenharia Química - Unicamp

Prof. Dr. Rogério Gonçalves dos Santos
Faculdade de Engenharia Mecânica - Unicamp

Campinas, 24 de julho de 2015.

Resumo

Tendo em vista os acidentes recorrentes de vazamento de gás em processos industriais, nos quais ocorreram perda de vidas e sérias consequências ecológicas, surge a necessidade de prover informações mais precisas para análise de risco. Como alternativa, vem sendo utilizada a fluidodinâmica computacional (CFD), que tem capacidade de simular situações que seriam onerosas de serem realizadas experimentalmente. Dentre as ferramentas de CFD existentes optou-se em trabalhar com o OpenFOAM (*Open Field Operation and Manipulation*), por ser um *software* de código aberto e livre, podendo ser utilizado tanto em aplicações acadêmicas quanto comerciais. A grande limitação deste programa reside em sua documentação limitada e na pouca informação de como aplicar suas utilidades. Assim, o objetivo deste trabalho é criar uma metodologia para simulação de dispersão de gás, tendo em vista a dificuldade na utilização do mesmo, uma vez que o OpenFOAM não possui uma interface gráfica, tão pouco suporte técnico. Para isso, foi necessário a customização de um *solver* já existente na base de dados do *software*. Na customização deste *solver* foram manipuladas apenas variáveis, sem modificação do código-fonte. Para validar as modificações, foram realizados alguns testes como: independência de malha, passo de tempo da simulação (número de Courant) e diferentes modelos de turbulência. Foram simulados alguns jatos de metano e ar, os quais foram comparados com dados experimentais retirados da literatura. Assim como, a avaliação de um caso de engenharia e comparação com o código comercial ANSYS-CFX. Os resultados obtidos pelo OpenFOAM foram muito próximos dos experimentais na análise de jatos e obtiveram boa concordância com a ferramenta comercial na obtenção da nuvem inflamável. Evidenciando a importância deste trabalho para ampliar a utilização de *softwares* livres.

Palavras-chave: CFD, OpenFOAM, *reactingFoam*, ANSYS-CFX, jatos, dispersão de gás, nuvem de gás inflamável.

Abstract

Given the recurring accidents of gas leaks in industrial processes, in which there were fatalities and serious ecological consequences, the need arises to provide more accurate information for risk analysis. Alternatively, has been used computational fluid dynamics (CFD), which has ability to simulate situations that would be costly to be performed experimentally. Among the existing CFD tools we chose to work with the OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) to be a free and open source software and can be used both in academic and commercial applications. The major limitation of this program lies in its limited documentation and little information on how to apply their utilities. The objective this work is to create a methodology for gas scattering simulation, in view of the difficulty in using it, since the OpenFOAM lacks a graphical interface, as little technical support. For this, the customization of a solver was necessary existing in the software database. In this customization solver were manipulated variables only, without changing the source code. To validate the modifications were carried out some tests as mesh independence, simulation time step (number of Courant) and different models of turbulence. Were simulated some methane and air jets, which were compared with experimental data taken from literature. As well as the evaluation of a case of engineering and compared to the commercial code ANSYS-CFX. The results obtained by OpenFOAM were very close to experimental analysis on the jets and obtained good agreement with the commercial tool obtaining the flammable cloud. Highlighting the importance of this work to expand use of free software.

Keywords: CFD, OpenFOAM, reactingFoam, ANSYS-CFX, jets, gas dispersion, flammable gas cloud.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Objetivo Geral	3
1.2	Objetivos Específicos	3
2	Fundamentos: Dispersão, Jatos, Nuvem Inflamável e CFD	5
2.1	Dispersão de Gás	5
2.2	Jatos	10
2.2.1	Jato Subsônico	12
2.2.2	Jato Sônico	14
2.3	Nuvem de Gás Inflamável	15
2.4	Fluidodinâmica Computacional (CFD)	16
3	Trabalhos na Área de Dispersão	19
4	Metodologia para Dispersão de Gás Utilizando o <i>Solver reactingFoam</i>	27
4.1	OpenFOAM	27
4.1.1	Pré-Processamento	29
4.1.2	Processamento - <i>Solver</i>	31
4.1.2.1	Propriedades	31
4.1.2.2	Condições de Contorno	32
4.1.2.3	Parâmetros de Simulação	33
4.1.3	Pós-Processamento	35

4.2	Modelagem Matemática	36
4.3	Turbulência	37
4.3.1	Modelos de Turbulência	38
4.3.2	Modelos RANS - <i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>	39
4.3.2.1	Modelo de Turbulência κ -epsilon ($\kappa - \varepsilon$)	40
4.3.2.2	Modelo de Turbulência κ -omega ($\kappa - \omega$)	41
4.3.2.3	Modelo de Turbulência κ -omega SST ($\kappa - \omega$ SST)	42
4.4	Validação	43
5	Validação da Metodologia através de Simulação de Jatos Axissimétricos	47
5.1	Geometria e Malha	47
5.2	Sensibilidade de Malha	48
5.3	Comparação com Jatos Experimentais	55
5.4	Análise do Número de <i>Courant</i> e dos Resíduos	59
5.5	Nuvem de Gás Inflamável	62
6	Estudo de Caso de Engenharia: Simulação de Dispersão em Plataforma <i>Offshore</i>	65
6.1	Sensibilidade de Malha	66
6.2	OpenFOAM <i>versus</i> ANSYS-CFX	70
7	Conclusões e Propostas para Trabalhos Futuros	75
7.1	Conclusões	75
7.2	Propostas para Trabalhos Futuros	76
	Referências Bibliográficas	79
A	Procedimento de Engenharia para Simulação de Dispersão de Gás no Open-FOAM	83
A.1	Geometria e Malha	83
A.2	Propriedades, Esquemas Numéricos e Controle da Simulação	92

A.3	Condições de Contorno	97
A.4	Pós-Processamento - Geração da nuvem	99
B	Procedimento de Engenharia para Simulação de Dispersão de Gás no ANSYS-CFX103	
B.1	Geometria e Malha	103
B.2	Pré-Processamento	108
B.2.1	Importação da malha	108
B.2.2	Seleção do material	109
B.2.3	Definições do domínio computacional	111
B.2.4	Condições de contorno	113
B.2.5	Esquemas numéricos e geração do executável	118
B.3	Pós-Processamento - Geração da nuvem	118

Agradecimentos

Gostaria de agradecer primeiramente à Deus, pois me deu forças para seguir nesta caminhada.

A minha família por ter me apoiado nos momentos de dificuldade. Principalmente à minha mãe, por ter me ouvido e ter me dado conforto em cada desafio que surgiu nesta jornada.

Aos meus amigos, que fizeram cada dia deste mestrado valer a pena: Raquel, André, Thalles, Manuella, Vitor e Isabela. Agradeço em especial pelo maior presente que ganhei neste mestrado, conhecer Juliana Pedrilho Foltin. Obrigada Ju por ser meu ombro amigo em todos os momentos, pelo companherismo e pelas risadas.

Quero agradecer também aos meus amigos e colegas do L4R1S4: Elmo, Raphael, Klaus, Renata e Victor, pelos momentos de descontração e pelas boas conversas do café! Em particular Elmo e Raphael pela ajuda neste trabalho.

Gostaria de agradecer também a Alexandre Oliveira, pela ajuda com o ANSYS-CFX, obrigada pela amizade e presteza na hora em que mais precisei!

Aos amigos do LESQ/LCAP pelos almoços no “bandejão” e por todos os momentos de alegria!

Agradeço também a DPR Engenharia pelo apoio prestado na etapa final deste trabalho.

Ao meu orientador Professor Sávio S. V. Vianna pelo suporte prestado e pela confiança depositada em mim para realização deste trabalho.

“Compartilhar conhecimento é uma forma de alcançar a imortalidade.”

Dalai Lama

Lista de Figuras

2.1	Fluxograma da classificação da dispersão. Adaptado de: Lees (2012)	6
2.2	Pluma formada por um vazamento contínuo (CCPS (2000) apud Fleck (2008)). . . .	7
2.3	<i>Puff</i> formado por um vazamento instantâneo (CCPS (2000) apud Fleck (2008)). . .	7
2.4	Fluxograma da classificação das condições atmosféricas. Adaptado de: Lees (2012) .	8
2.5	Altura versus velocidade do vento acima do solo (os números dentro da figura são as percentagens de velocidade máxima ao longo da altura) (Adaptado de Lees (2012)). .	9
2.6	Relação entre a velocidade do vento a 10 metros de altura e o delta de temperatura para cada inverso do comprimento de Monin-Obukhov (Adaptado de Bakum e Duijm (2005)).	10
2.7	Zonas de um jato (Adaptado de Benintendi (2010)).	11
2.8	Escoamento de um jato retangular mostrando todas as zonas de decaimento (Adaptado de Wakes <i>et al.</i> (2002)).	12
2.9	Demonstração das condições de saída de um jato.	13
2.10	Jato sônico sub-expandido (<i>M</i> - número de Mach) (Adaptado de Lees (2012)). . . .	14
2.11	Limites de inflamabilidade para o metano.	16
2.12	Etapas de solução de um problema em CFD.	17
3.1	Diagrama esquemático do experimento de jato supercrítico (Adaptado de Birch <i>et al.</i> (1984)).	19

3.2	Diagrama esquemático do experimento MUST (o detalhe mostra onde ocorreu o vazamento). Fonte: http://mech.utah.edu/pardyjak/exdata/MUST.php	21
3.3	Foto do experimento MUST. Fonte: http://mech.utah.edu/pardyjak/exdata/MUST.php	21
4.1	Visão geral da estrutura do OpenFOAM (OpenFOAM (2014a)).	28
4.2	Estrutura de um caso em OpenFOAM. (OpenFOAM (2014a)).	28
4.3	Fluxograma da simulação.	29
4.4	Modelos de resolução da turbulência: (a) DNS, (b) LES e (c) RANS.	39
4.5	Fluxograma dos testes desenvolvidos na etapa de validação do <i>Solver</i>	45
5.1	Malha utilizada nas simulações de jato das Seções 5.2, 5.3, 5.4 - (a) Domínio computacional com as seguintes dimensões: base com 0,1 por 0,05 m e 1,0 m de altura - orifício de 2,4 mm de lado , (b) Detalhe do refinamento tamanho da célula - malha base: 8,33 mm, nível 1: 4,17 mm, nível 2: 2,08 mm e nível 3: 1,04 mm. . . .	48
5.2	Análise de sensibilidade de malha no decaimento da velocidade do jato de ar subsônico - modelo de turbulência κ -omega SST.	50
5.3	Velocidade na célula para jato subsônico de ar: modelo de turbulência κ -omega SST - (a) Grid_01, (b) Grid_02 e (c) Grid_03.	50
5.4	Análise de sensibilidade de malha no decaimento da velocidade do jato de ar subsônico - modelo de turbulência κ -epsilon.	51
5.5	Velocidade na célula para jato subsônico de ar: modelo de turbulência κ -epsilon: (a) Malha com 12820 células (Grid_01), (b) Malha com 20496 células (Grid_02), (c) Malha com 25310 células (Grid_03) e (d) Malha com 37628 células.	51
5.6	Análise de sensibilidade de malha no decaimento da velocidade do jato de ar sônico - modelo de turbulência κ -omega SST.	52

5.7	Análise de sensibilidade de malha no decaimento da velocidade do jato de ar sônico - modelo de turbulência κ -epsilon.	53
5.8	Decaimento da fração molar de metano na linha central do jato subsônico em razão a distância normalizada com o diâmetro do furo: análise de sensibilidade de malha (Y= distância axial, D= diâmetro do furo).	54
5.9	Decaimento da fração molar de metano na linha central do jato sônico em razão a distância normalizada com o diâmetro do furo: análise de sensibilidade de malha (Y= distância axial, D= diâmetro do furo).	55
5.10	Decaimento da velocidade na linha central do jato de ar em razão a distância normalizada com o diâmetro do furo para condição de saída subsônica: teste dos modelos de turbulência (Y= distância axial, D= diâmetro do furo).	56
5.11	Decaimento da velocidade na linha central do jato de ar em razão a distância normalizada com o diâmetro do furo para condição de saída subsônica (Y= distância axial, D= diâmetro do furo): comparação com a ferramenta comercial ANSYS-CFX.	57
5.12	Decaimento da velocidade na linha central do jato de ar em razão a distância normalizada com o diâmetro do furo para condição de saída sônica (Y= distância axial, D= diâmetro do furo): (a) comparação com Birch <i>et al.</i> (1987) e (b) comparação com Chuech <i>et al.</i> (1989).	58
5.13	Decaimento da concentração de metano na linha central do jato de ar em razão a distância normalizada com o diâmetro do furo para condição de saída subsônica (Y= distância axial, D= diâmetro do furo): comparação com Birch <i>et al.</i> (1984).	58
5.14	Decaimento da concentração de metano na linha central do jato de ar em razão a distância normalizada com o diâmetro do furo para condição de saída sônica (Y= distância axial, D= diâmetro do furo): comparação com Birch <i>et al.</i> (1984).	59
5.15	Jato subsônico de metano: Experimental - (a) (Birch <i>et al.</i> (1984)), (b) OpenFOAM.	59

5.16	(a)Análise da influência do passo numérico no decaimento da velocidade de jato de ar subsônico, (b) Resíduo da velocidade axial por passo de tempo simulado.	60
5.17	Análise da influência do passo numérico no decaimento da velocidade de jato de ar sônico: (a) Comparação com Birch <i>et al.</i> (1987), (b) Comparação com Chuech <i>et al.</i> (1989) e (c) Resíduo da velocidade axial por passo de tempo simulado.	60
5.18	(a)Análise da influência do passo numérico no decaimento da fração molar do jato de metano subsônico, (b) Resíduo da concentração axial por passo de tempo simulado.	61
5.19	(a)Análise da influência do passo numérico no decaimento da fração molar do jato de metano sônico , (b) Resíduo da concentração axial por passo de tempo simulado. .	62
5.20	Simulação de nuvem de gás inflamável no OpenFOAM - Domínio computacional com as seguintes dimensões: base com 1x1 m e 10 m de altura - orifício de 9,4 mm de lado- (a) nuvem, (b) corte da nuvem.	63
6.1	Dimensões da plataforma e do domínio computacional utilizados na simulação. . . .	66
6.2	Direções de vento e localização da fonte de vazamento na plataforma.	66
6.3	Malha utilizada nas simulações da plataforma <i>offshore</i> - (a) Estrutura 3D da plataforma - Malha OpenFOAM, (b)Estrutura 3D da plataforma - Malha ANSYS-ICEM, (c) Vista em corte - Malha OpenFOAM e (d) Vista em corte - Malha ANSYS-ICEM.	67
6.4	Análise de sensibilidade de malha para a simulação da plataforma <i>offshore</i> executada na ferramenta ANSYS-CFX - Nuvem inflamável gerada pela ventilação da direção leste.	69
6.5	Análise de sensibilidade de malha para a simulação da plataforma <i>offshore</i> executada na ferramenta OpenFOAM - Evolução do volume da nuvem inflamável ao longo do tempo: (a) Leste, (b) Oeste, (c) Norte e (d) Sul.	70

6.6	Nuvem de gás inflamável com ventilação na direção Leste - Iso-contorno da nuvem:	
	(a) vista superior em corte - OpenFOAM, (b) vista superior em corte - ANSYS-CFX,	
	(c) vista lateral em corte - OpenFOAM, (d) vista lateral em corte - ANSYS-CFX. . .	72
6.7	Nuvem de gás inflamável com ventilação na direção Oeste - Iso-contorno da nuvem:	
	(a) vista superior em corte - OpenFOAM, (b) vista superior em corte - ANSYS-CFX,	
	(c) vista lateral em corte - OpenFOAM, (d) vista lateral em corte - ANSYS-CFX. . .	72
6.8	Nuvem de gás inflamável com ventilação na direção Norte - Iso-contorno da nuvem:	
	(a) vista superior em corte - OpenFOAM, (b) vista superior em corte - ANSYS-CFX,	
	(c) vista lateral em corte - OpenFOAM, (d) vista lateral em corte - ANSYS-CFX. . .	73
6.9	Nuvem de gás inflamável com ventilação na direção Sul - Iso-contorno da nuvem:	
	(a) vista superior em corte - OpenFOAM, (b) vista superior em corte - ANSYS-CFX,	
	(c) vista lateral em corte - OpenFOAM, (d) vista lateral em corte - ANSYS-CFX. . .	73
A.1	Estrutura do caso tutorial do <i>solver reactingFoam</i>	83
A.2	Criação um caso na ferramenta HELYX-OS®.	84
A.3	Importação de geometria STL no HELYX-OS®.	84
A.4	Definição do domínio computacional.	85
A.5	Nomeação das superfícies do domínio.	86
A.6	Geração da geometria que dará suporte a região de vazamento de gás.	86
A.7	Determinação das zonas de refinamento 1, 2, 3, 4 e 5.	87
A.8	Alocação do <i>Material Point</i>	88
A.9	Desabilitação do <i>Snapping</i> e do <i>Layers</i>	88
A.10	Geração da malha.	89
A.11	Criação do novo caso e cópia dos arquivos do caso tutorial <i>reactingFoam</i>	89
A.12	Cópia dos arquivos de malha gerados no HELYX-OS® para o caso novo.	90

A.13 Edição do arquivo <i>blockMeshDict</i>	90
A.14 Cópia dos arquivos para delimitação da região de vazamento.	91
A.15 Edição do arquivo <i>topoSetDict</i> para alocação do vazamento.	91
A.16 Edição do arquivo <i>boundary</i> para agrupar condições de contorno.	92
A.17 Arquivos que contêm as propriedades e que devem ser modificados.	93
A.18 Edição do arquivo <i>fvScheme</i> para dispersão.	95
A.19 Cópia do arquivo <i>fvSolution</i>	96
A.20 Edição do arquivo <i>fvSolution</i> para dispersão.	96
A.21 Arquivos de condição de contorno - α , CH ₄ , N ₂ e O ₂	97
A.22 Arquivos de condição de contorno - epsilon, k, μ , Ydefault.	98
A.23 Arquivos de condição de contorno - T, U, p, p_rgh.	99
A.24 Conversão da fração mássica para molar no Paraview.	100
A.25 Seleção do utilitário <i>IsoVolume</i>	100
A.26 Determinação da região de Isovolum.	100
A.27 Cálculo do volume da nuvem inflamável.	101
A.28 Volume da nuvem inflamável.	101
B.1 Criação de geometrias no ICEM.	104
B.2 Criação da partes para aplicação da condição de contorno.	104
B.3 Especificação da superfície para aplicação da condição para vazamento de gás.	105
B.4 Criação do <i>body</i>	105
B.5 Parâmetros para criação da malha no ICEM.	106
B.6 Geração da malha no ICEM	106

B.7	Exportação da malha gerada no ICEM para o <i>solver</i> ANSYS-CFX.	107
B.8	Exportação da malha gerada no ICEM para o <i>solver</i> Fluent.	107
B.9	Estrutura do caso de dispersão.	108
B.10	Importação da malha.	109
B.11	Escolha do material.	109
B.12	Escolha dos gases.	110
B.13	Tipo de regime adotado.	111
B.14	Definições básicas do domínio computacional.	112
B.15	Definições para os fluidos.	113
B.16	Expressão aplicada na condição de saída.	113
B.17	Demonstração de aplicação da condição de contorno de parede.	114
B.18	Demonstração de aplicação da condição para o vazamento de gás.	115
B.19	Demonstração de aplicação da condição para as saídas.	116
B.20	Demonstração de aplicação da condição para a ventilação.	117
B.21	Demonstração da etapa de escolha dos esquemas numéricos e geração do executável.	118
B.22	Geração na nuvem inflamável no ANSYS-CFX.	119
B.23	Geração na nuvem inflamável no ANSYS-CFX.	119
B.24	Nuvem inflamável gerada no ANSYS-CFX.	120
B.25	Cálculo do volume da nuvem inflamável gerada no ANSYS-CFX.	120

Lista de Tabelas

2.1	Composição típica do gás natural (Natural Gas Org (2014)	15
2.2	Limites de flamabilidade para alguns gases.	16
4.1	Tipos de <i>Patch</i>	33
4.2	Especificações Numéricas	34
4.3	Solvers Lineares	35
4.4	Pré-condicionador dos gradientes conjugados	35
5.1	Condições de contorno aplicadas no orifício de vazamento para simular jato de ar subsônico	49
5.2	Identificação das malhas utilizadas na simulação de jatos de ar	49
5.3	Condições de contorno aplicadas no orifício de vazamento para simular jato de ar sônico	52
5.4	Identificação das malhas utilizadas na simulação de jato de metano	53
5.5	Condições de contorno aplicadas no orifício de vazamento para simular jato de metano subsônico	54
5.6	Condições utilizadas para simular jato sônico de metano	55
5.7	Tempo de simulação computacional de jatos de ar com diferentes números de <i>Courant</i>	61

5.8	Tempo de simulação computacional de jatos de metano com diferentes números de Courant	62
6.1	Identificação das malhas utilizadas na simulação em plataforma <i>offshore</i> . . .	67
6.2	Condição de Contorno Aplicada na Simulação de Dispersão de Gás no OpenFOAM e no ANSYS-CFX	68
6.3	Parâmetros da Simulação de Dispersão de Gás no OpenFOAM e no ANSYS-CFX	68
6.4	Volume da nuvem de gás inflamável - OpenFOAM <i>versus</i> ANSYS-CFX . . .	71
A.1	Propriedades Químicas (<i>chemistryProperties</i>)	93
A.2	Propriedades de Combustão (<i>combustionProperties</i>)	93
A.3	Aceleração da Gravidade (<i>g</i>)	93
A.4	Reações (<i>reactions</i>)	94
A.5	Propriedades Termofísicas (<i>thermophysicalProperties</i>)	94
A.6	Propriedades de Turbulência (<i>turbulenceProperties</i>)	94
A.7	Propriedade do Modelo RANS (<i>RASProperties</i>)	95

Capítulo 1

Introdução

São inúmeros os acidentes com vazamentos de gases em processos industriais, sendo alguns muito trágicos em relação às perdas de vidas e às consequências ambientais. Como o que aconteceu na plataforma *Piper Alpha* em 1988. Localizada no mar do norte, a plataforma *Piper Alpha* foi destruída por um série de explosões. Este acidente vitimou 167 trabalhadores e causou um prejuízo de mais de 1 bilhão de libras (Macalister (2013)).

Já no Brasil, o maior acidente deste gênero registrado foi o naufrágio da então considerada maior plataforma do mundo, a P-36, localizada na Bacia de Campos, ocorrido em 2001, no qual a estrutura marítima perdeu a estabilidade estrutural, após vazamento de gás seguido de explosão, este acidente culminou no naufrágio da plataforma e causou a morte de 11 trabalhadores (Dieguez e Carneiro (2001)).

Entretanto, mesmo com a ocorrência destes eventos, no Brasil este tipo de sinistro ainda é recorrente. Recentemente no dia 11 de fevereiro de 2015, ocorreu a explosão do navio-plataforma FPSO Cidade São Mateus, que deixou seis mortos, três desaparecidos e vinte e seis funcionários ficaram feridos. Este navio-plataforma era operado pela *BW Offshore* e afretado pela Petrobras (Nobres (2015)). Além da perda de vidas, a explosão também causou dano a estrutura do navio.

Entre as causas destes acidentes é apontada a deficiência do projeto no que tange a classificação das áreas, sendo negligenciadas zonas de risco, acarretando na falta de dispositivos de detecção e contenção de gás, além de equipamentos resistentes a explosões.

A determinação da área de risco, onde devem ser adotadas medidas de mitigação, é feita com base na análise de estudos de dispersão de gás com formação de nuvem inflamável. A nuvem de gás inflamável é formada quando um gás combustível alcança os limites de explosividade. Estes limites compreendem uma faixa na qual a mistura ar/combustível é ideal para que ocorra combustão. Além disso, plataformas de petróleo possuem muitas

áreas congestionadas onde pode ocorrer confinamento de gás contribuindo para ocorrência de cenários de explosão.

Como forma a gerar dados para estimar o risco, no sentido de adotar medidas de redução e alocar de forma correta detectores de gás, surgiu a necessidade de simular cenários de vazamento de gás com formação de nuvem inflamável, assim como, analisar o comportamento da nuvem, sua interação com os obstáculos e sua dissipação.

Estes cenários podem ser realizados experimentalmente, entretanto, requer-se alto investimento financeiro. Diante disso, o uso da simulação computacional torna-se uma alternativa, com menor custo, para avaliar como o vazamento de gás irá se desenvolver e estimar o volume da nuvem inflamável gerada.

Uma ferramenta bastante empregada neste tipo de análise é a Fluidodinâmica Computacional (CFD), a qual estuda a solução das equações de escoamento de fluido através da utilização de métodos numéricos. Dentre as vantagens da análise CFD estão: excelente visualização através de gráficos computacionais, repetitividade e possibilidade de simular situações em escala real.

Existem muitos pacotes de CFD, alguns deles comerciais e outros gratuitos. Os comerciais são bem consolidados no mercado porque usam modelos validados, além disso possuem suporte técnico ao usuário e são amplamente utilizados em universidades e indústrias. Por outro lado, as licenças tem alto custo.

Assim, neste trabalho optou-se por utilizar o OpenFOAM por ser um *software* gratuito. O OpenFOAM é uma ferramenta livre de código aberto que pode ser utilizado tanto em aplicações acadêmicas quanto comerciais. Ele permite que o usuário crie seu próprio *solver* ou customize os já existentes em seu banco de dados. A principal limitação desta ferramenta reside na falta de informação de como utilizá-la, pois a mesma não possui documentação completa, tão pouco suporte técnico.

Logo, este trabalho visa fornecer informações para simular vazamento de gás no OpenFOAM. Tendo em vista a importância da obtenção de dados confiáveis para aplicações em casos de engenharia. Além disto, ampliar a utilização de ferramentas livres em aplicações de dispersão de gás.

1.1 Objetivo Geral

O principal objetivo deste trabalho é o desenvolvimento de uma metodologia por meio de modelagem CFD utilizando o OpenFOAM na análise de dispersão de gás. O trabalho também visa fornecer uma orientação confiável para utilização desta ferramenta CFD em aplicações de engenharia.

1.2 Objetivos Específicos

Mais especificamente, os seguintes pontos serão abordados:

- Validação do *solver ReactingFoam* na modelagem de dispersão de gás por meio da simulação de jatos e comparação dados experimentais retirados da literatura.
- Teste de sensibilidade de malha e de modelos de turbulência para a abordagem RANS (*Reynolds-Averaged Navier–Stokes*).
- Estudo da influência do número de CFL (*Courant-Friedrichs-Lewy*) em problemas de dispersão de gás.
- Cálculo da nuvem de gás inflamável.
- Estudo de caso de engenharia e comparação com a ferramenta ANSYS-CFX.

Capítulo 2

Fundamentos: Dispersão, Jatos, Nuvem Inflamável e CFD

Este capítulo compila na primeira seção as variáveis que influenciam o fenômeno da dispersão. Na segunda parte é feita uma revisão sobre a fonte de vazamento de gás utilizada nas simulações, neste caso, o jato. Na terceira parte são abordadas as características da nuvem de gás inflamável. E o último tópico apresenta uma visão geral sobre a modelagem CFD.

2.1 Dispersão de Gás

O fenômeno de dispersão pode ser classificado de duas formas, a primeira em relação as características do fluido e a segunda com relação a fonte geradora do vazamento.

Como ilustrado na Figura 2.1, o fluido pode ser classificado como neutro, positivo ou negativo em relação ao seu empuxo (*buoyancy*). Esta relação está expressa na Equação 2.1.

$$\vec{F}_g = (\rho_{gas} - \rho_{ar}) \cdot \vec{g} \quad (2.1)$$

em que: \vec{F}_g é a força de empuxo; ρ é a massa específica; \vec{g} é a aceleração da gravidade.

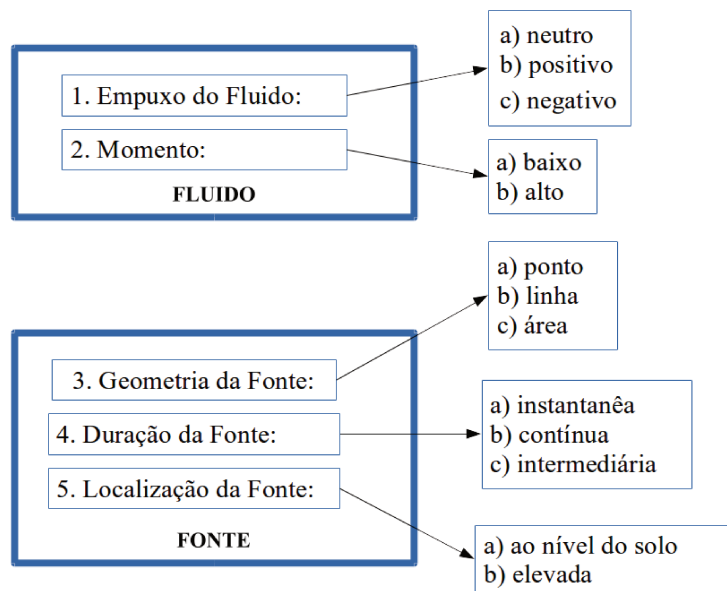


Figura 2.1: Fluxograma da classificação da dispersão. Adaptado de: Lees (2012)

O fluido classificado como neutro é aquele que possui densidade próxima a densidade do ar e por isso tende a ficar estável. Já os que são negativos ou gases pesados são os que possuem alta densidade, ou seja densidade maior que a do ar, logo tendem a se depositar próximo ao solo, são exemplos deste tipo de gás a amônia, o GLP e o CO₂. Por último, os positivos incluem gases com baixo peso molecular e gases quentes, estes tendem a subir, pois são mais leves que ar, como é o caso do metano (Lees (2012), Mack e Spruijt (2013)).

A dispersão de um material sendo emitido de um vazamento em uma planta é determinada pelo seu momento e pela gravidade. O momento, que leva em consideração a energia cinética do fluido, é uma variável importante na dispersão. Se as forças de momento predominam, o fluido forma um jato que possui forma característica, já se as forças gravitacionais predominam, forma-se uma pluma. O momento relacionado a um vazamento influencia diretamente no grau de mistura ar/gás. Condições de emissão com elevada energia cinética aumentam o nível de mistura, o que influencia diretamente na densidade da nuvem e no comportamento da dispersão. No entanto, se a dispersão, seja dominada pelo momento ou pela gravidade, diminui de intensidade, a turbulência atmosférica passa a ser o fator predominante (Lees (2012)).

Já com relação a fonte geradora do vazamento, existem três formas possíveis: o vazamento por meio de ponto, linha ou área. Normalmente, o primeiro está relacionado, por exemplo, a ruptura de uma linha de processo. O segundo, a vaporização de uma poça, já o terceiro está relacionado a um reservatório de grandes dimensões (Lees (2012)).

O tipo de emissão pode ser: contínuo, o que geralmente levará a formação de uma pluma (conforme Figura 2.2), instantâneo o que levará a um *puff* (conforme Figura 2.3) ou intermediário que pode comportar-se como ambos dependendo da condição (Lees (2012)).

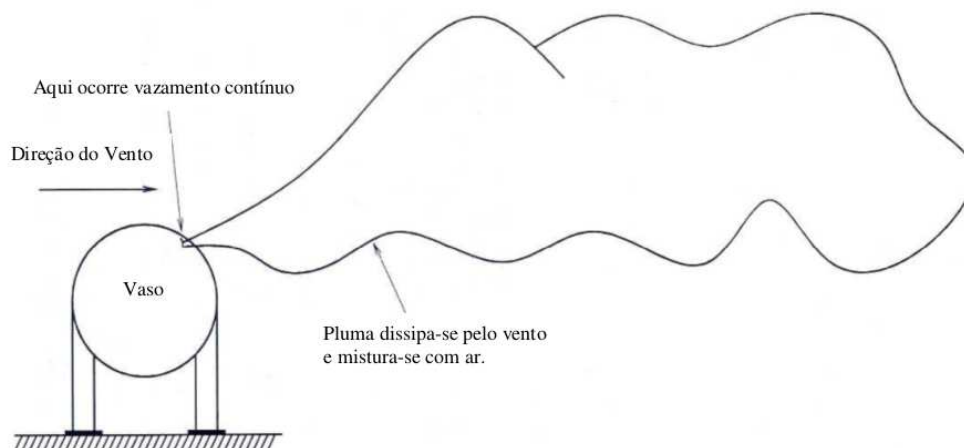


Figura 2.2: Pluma formada por um vazamento contínuo (CCPS (2000) apud Fleck (2008)).

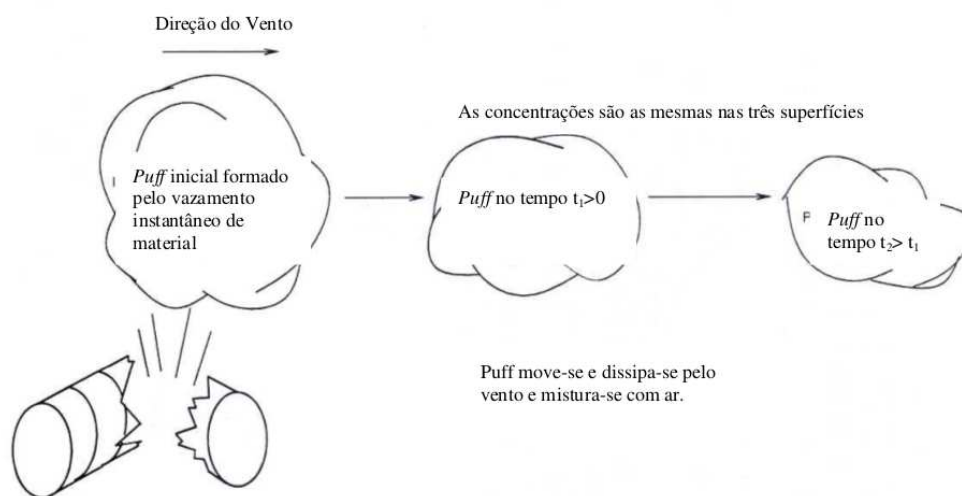


Figura 2.3: *Puff* formado por um vazamento instantâneo (CCPS (2000) apud Fleck (2008)).

A última variável que afeta o fenômeno de dispersão com relação a fonte é a localização da mesma. Esta pode estar junto ao solo ou elevada. A maior parte dos vazamentos perigosos são tratados como sendo de fontes ao nível do solo. Já aqueles relacionados a condições elevadas, caracterizam exaustores e chaminés. (Lees (2012)).

A condição atmosférica é outro fator determinante no comportamento da dispersão, pois é onde o fenômeno vai se desenvolver. Há algumas variáveis que devem ser levadas em consideração como: topologia e condições meteorológicas. As principais delas estão demonstradas na Figura 2.4 (Lees (2012)):

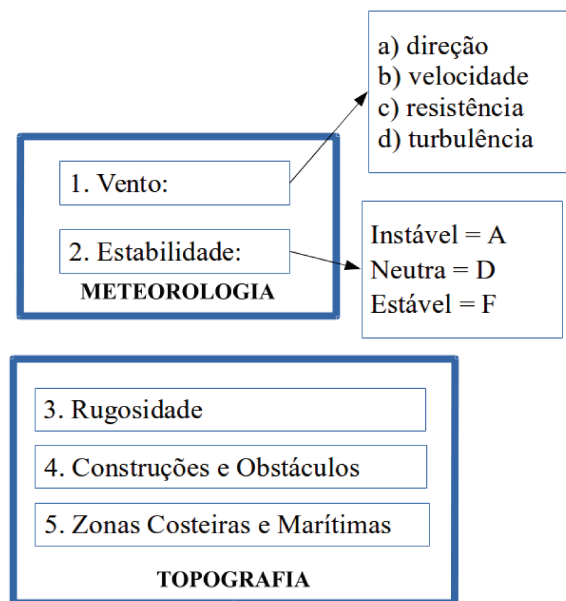


Figura 2.4: Fluxograma da classificação das condições atmosféricas. Adaptado de: Lees (2012)

Na variável meteorológica, a estabilidade atmosférica é o fator determinante no cálculo do nível de mistura ou comprimento de mistura. Sua classificação básica e a correspondente no modelo de estabilidade de Pasquill estão demonstradas na Figura 2.4 (Bakkum e Duijm (2005)).

A classe de estabilidade Pasquill leva em consideração o perfil do vento na altura de 10 metros e possui uma faixa de classificação de A a F. Esta classificação determina a estabilidade marítima, o que é muito importante em plataformas *offshore*, a estabilidade neste caso também depende da diferença entre as temperaturas da água do mar e do ar (Bakkum e Duijm (2005)).

A dispersão é favorecida pela instabilidade da condição atmosférica, em contrapartida, em condições estáveis ocorre estagnação. A topografia é uma variável que afeta o perfil do vento, que está diretamente relacionado à rugosidade e aos obstáculos como áreas urbanas, por exemplo. O vento segue perfil logarítmico, como pode ser observado na Figura 2.5. Suas principais características são dispostas na Figura 2.4 (Lees (2012)).

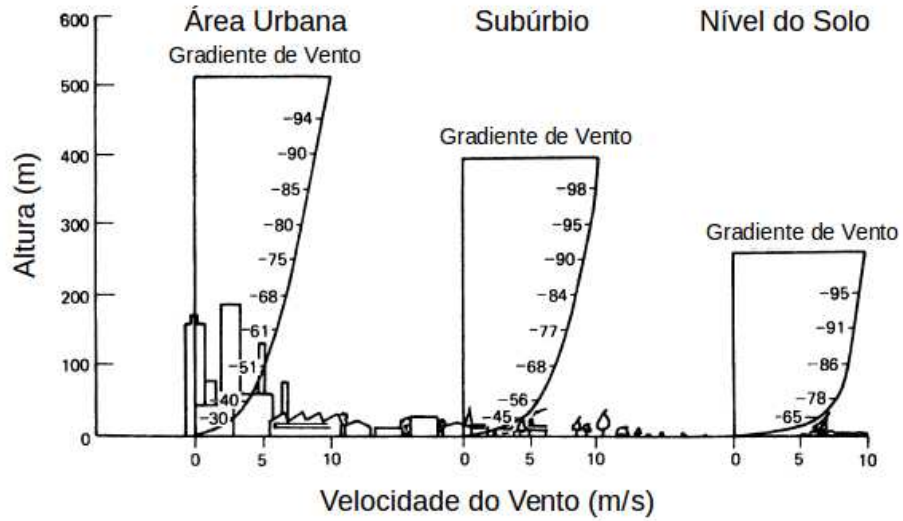


Figura 2.5: Altura versus velocidade do vento acima do solo (os números dentro da figura são as percentagens de velocidade máxima ao longo da altura) (Adaptado de Lees (2012)).

O perfil log-linear vertical da velocidade do vento é caracterizado pela Equação empírica 2.2. Esta equação pode ser aplicada para poucas condições instáveis, mas para uma grande gama de condições estáveis (Lees (2012)).

$$u = \frac{u_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) + \alpha \frac{z}{L} \right] \quad (2.2)$$

em que:

u_* é a velocidade de atrito;

κ é a constante de von Karman com valor 0,4;

z_0 é o comprimento rugoso;

L é o comprimento de Monin-Obukhov;

α é o coeficiente de Monin-Obukhov;

O comprimento de Monin-Obukhov para a condição marítima pode ser predito pela Figura 2.6, esta condição é caracterizada por uma distância da costa de 5 km e uma profundidade maior que 1 m (Bakkum e Duijm (2005)).

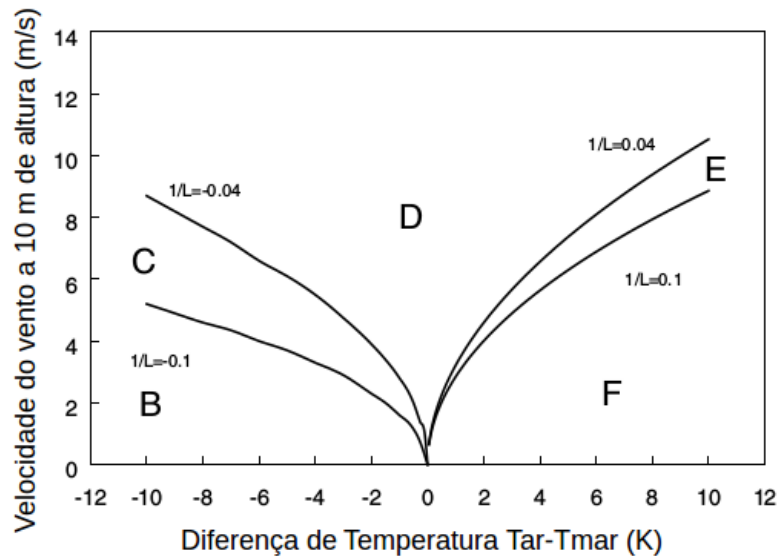


Figura 2.6: Relação entre a velocidade do vento a 10 metros de altura e o delta de temperatura para cada inverso do comprimento de Monin-Obukhov (Adaptado de Bakum e Duijm (2005)).

2.2 Jatos

Como já mencionado, o momento do fluido é um fator primordial no fenômeno da dispersão. Sendo assim, vazamentos de gás com alto momento chamados de *momentum jets* possuem as seguintes características (Lees (2012)):

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

Além destas características as seguintes suposições também são assumidas (Lees (2012)):

1. Os perfis de velocidade e concentração seguem uma distribuição gaussiana, após atingir a distância axial de 10 vezes o diâmetro do furo;
2. No arraste do ar não ocorre perda de momento, assim o fluxo de momento é o mesmo em qualquer corte normal a linha central do jato.

Na Figura 2.7 está demonstrada a estrutura típica de um jato. Sendo que, a primeira parte do escoamento é a região do núcleo potencial (chamado *core* ou *potential core*) de um jato. Nesta região, o arraste de ar é inicialmente observado, sendo que o núcleo potencial caracteriza a região onde a velocidade na linha central é constante. A definição adequada da zona de núcleo proporciona uma estimativa razoável para o cálculo do ângulo de espalhamento (α). A segunda é a zona de transição, na qual começam a aparecer os vórtices turbulentos. E a última é zona caracterizada pelo escoamento plenamente desenvolvido, a qual é marcada pela aproximação de uma distribuição Gaussiana do perfil de velocidade (Benintendi (2010)).

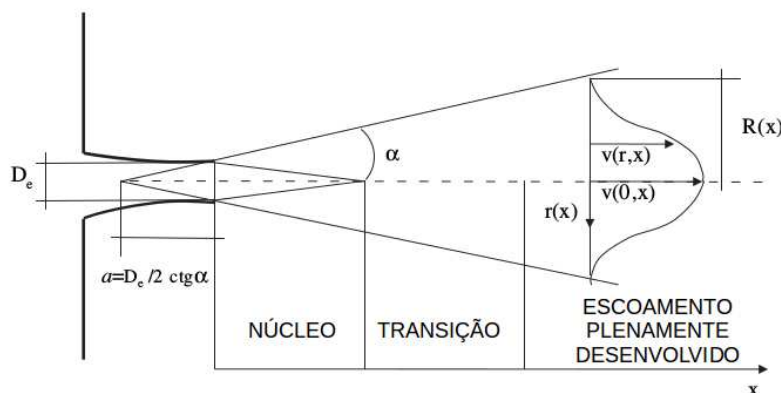


Figura 2.7: Zonas de um jato (Adaptado de Benintendi (2010)).

Levando em consideração que as características de um jato também são função da geometria de sua fonte geradora, é possível classificar jatos em três sub-categorias: jatos tridimensionais, jato bidimensional (plano) e jato circular transversal (axissimétrico), conforme descrito a seguir (Wakes *et al.* (2002)):

- **Jato tridimensional**

Jatos tridimensionais são aqueles em que as propriedades variam nas três dimensões. Com relação a geometria do bocal podem ser: retangulares, elípticos, triangulares ou gerados por orifício de vazamento assimétricos. Segundo resultados apontados nos experimentos de Sforza *et al.* (1966), existem três regiões distintas de decaimento da velocidade axial, como pode ser observado na Figura 2.8. A primeira é o núcleo potencial. A segunda é a região de decaimento característico, sendo verificado nos experimentos de Sforza *et al.* (1966) que esta taxa de decaimento é proporcional a distância à jusante elevada a um expoente de valor entre 0,5 (para jatos bidimensionais) e 1 (decaimento similar ao axissimétrico). E na última região o jato se comporta como jato axissimétrico. Na região distante do furo jatos de duas e três dimensões possuem comportamento similar (Wakes *et al.* (2002)).

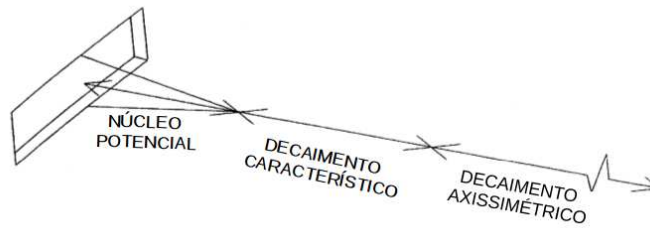


Figura 2.8: Escoamento de um jato retangular mostrando todas as zonas de decaimento (Adaptado de Wakes *et al.* (2002)).

- **Jato Axissimétrico (circular) e Jato Plano (bidimensional)**

De acordo com os experimentos de Mih (1989) tanto jatos planares quanto circulares, possuem distribuição de velocidade gaussiana na região de escoamento plenamente desenvolvida. Assim, o que diferencia estes jatos é a região do decaimento característico, pois este se baseia no formato do orifício de vazamento.

Mih (1989) também reporta com base em seus experimentos a distância do núcleo potencial, sendo 6,9 vezes o diâmetro do orifício para jatos axissimétricos e 6,0 vezes para jatos planos. Outra característica analisada por este autor é o ângulo de espalhamento do jato, assim sendo mencionados os valores de 13° para jato axissimétrico e 15° para jatos planos. Além disto, em jatos bidimensionais as propriedades independem da dimensão do bocal de saída, desta forma são função apenas do momento do jato (Wakes *et al.* (2002)).

O tipo de jato que é mais utilizado em se tratando de análise de risco de vazamento em plantas químicas, é o jato axissimétrico, entretando, como foi demonstrado, existem algumas divergências, com relação ao perfil de decaimento da velocidade e concentração, quando se compara este com outros tipos de orifício. Assim, a análise e consideração do formato do orifício deve ser realizada com cautela (Wakes *et al.* (2002)).

2.2.1 Jato Subsônico

Para realizar a simulação de jatos, deve ser determinada a condição de saída, que é caracterizada por pressão, temperatura e velocidade, conforme apresentado na Figura 2.9.

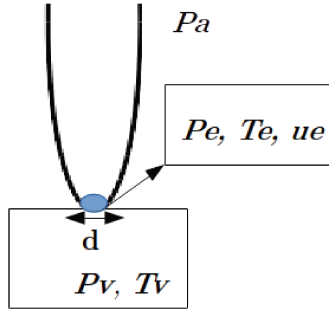


Figura 2.9: Demonstração das condições de saída de um jato.

Esta condição é definida por meio de correlações termodinâmicas de expansão do gás, as quais levam em consideração a condição de estagnação dentro do reservatório. Assim sendo, a condição de saída subsônica é caracterizada por:

$$\frac{P_v}{P_a} < \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{\left(\frac{\gamma}{\gamma - 1} \right)} \quad (2.3)$$

Onde a razão entre a pressão dentro do reservatório (P_v) e a atmosférica (P_a) é menor que o fator de razão dos calores específicos (γ), neste caso a condição de saída do jato pode ser estimada pelas seguintes Equações (Lees (2012)):

$$P_E = P_a \quad (2.4)$$

$$T_E = T_v \left(\frac{P_a}{P_v} \right)^{\left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)} \quad (2.5)$$

$$\rho_E = \rho_v \left(\frac{P_a}{P_v} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \quad (2.6)$$

$$u_E = \left(\frac{2\gamma}{\gamma - 1} \frac{RT_v}{W} \left[1 - \frac{P_a^{\left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)}}{P_v} \right] \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.7)$$

em que P é a pressão absoluta, R é a constante universal dos gases, T é a temperatura, W é a massa molar, γ é a razão entre os calores específicos do gás, e os índices a , E e v definem as condições atmosféricas, de saída e no reservatório, respectivamente (Lees (2012)).

2.2.2 Jato Sônico

Uma abordagem diferente deve ser utilizada para condição sônica de escoamento. A Figura 2.10 apresenta a estrutura de um jato sônico sub-expandido. Na condição sônica a razão entre a pressão dentro do reservatório (P_v) e a atmosférica (P_a) é maior que o fator de razão dos calores específicos (γ).

Logo na saída do jato a velocidade aumenta, ocasionada pela expansão isentrópica do gás, a velocidade sobe acima da velocidade de Mach 1, caracterizando um escoamento supersônico. O gás acaba ficando “bloqueado” o que gera a recompressão do gás, a delimitação desta região é conhecida como *Mach disk*, após o *Mach disk* o escoamento se torna sônico novamente. É importante saber a distância do *Mach disk*, pois é a partir desta região que ocorrerá arraste de ar, ou seja, é onde começa a ocorrer a mistura gás/ar (Lees (2012), Benintendi (2010)).

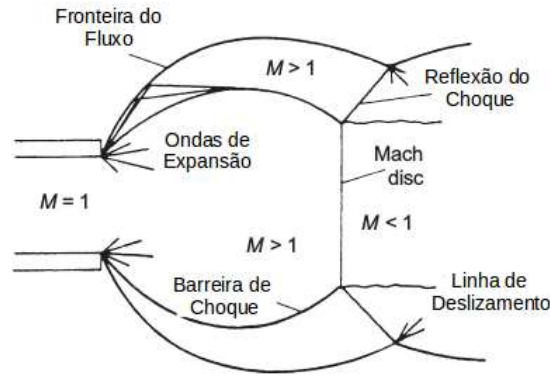


Figura 2.10: Jato sônico sub-expandido (M - número de Mach) (Adaptado de Lees (2012)).

A condição sônica é caracterizada pela relação:

$$\frac{P_v}{P_a} \geq \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{\left(\frac{\gamma}{\gamma - 1} \right)} \quad (2.8)$$

Segundo Lees (2012) as Equações que definem a condição de saída sônica são as seguintes:

$$P_E = P_v \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (2.9)$$

$$T_E = T_v \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right) \quad (2.10)$$

$$\rho_E = \rho_v \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \frac{W}{RT_v} \quad (2.11)$$

$$u_E = \left(\frac{2\gamma}{\gamma + 1} \frac{RT_v}{W} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.12)$$

em que P é a pressão absoluta, R é a constante universal dos gases, T é a temperatura, W é a massa molar, γ é a razão entre os calores específicos do gás, e os índices a , E e v definem as condições atmosférica, de saída e no reservatório, respectivamente.

2.3 Nuvem de Gás Inflamável

Após o vazamento de um jato e assim que a dispersão atinge o regime estacionário, determina-se o cenário final de formação da nuvem de gás inflamável. Como se sabe o gás natural é composto de gases leves, sendo o principal componente o metano, como pode ser verificado na Tabela 2.1.

Tabela 2.1: Composição típica do gás natural (Natural Gas Org (2014))

Componente	Fórmula Molecular	Fração Volumétrica (%)
Metano	CH ₄	70-90
Etano	C ₂ H ₆	0-20
Propano	C ₃ H ₈	0-20
Butano	C ₄ H ₁₀	0-20
Dióxido de Carbono	CO ₂	0-8
Oxigênio	O ₂	0-0,2
Nitrogênio	N ₂	0-5
Sulfeto de Hidrogênio	H ₂ S	0-5
Gases Raros	Ar, He, Ne, Xe	traço

Do ponto de vista de segurança, o metano destaca-se pois possui massa específica menor que a do ar. O aspecto positivo é sua fácil dispersão, por outro lado, se ocorrer acúmulo de gás, a mistura de metano, em concentrações adequadas com o oxigênio presente no ar forma uma mistura combustível.

Para que ocorra combustão a união de dois elementos faz-se necessária: combustível e comburente. A explosão só irá ocorrer caso a composição volumétrica combustível/comburente alcance uma faixa de mistura ideal. Essa faixa compreende o limite de explosividade superior e inferior. Este limite está relacionado as propriedades do gás, com isso assumindo valores diferentes para cada tipo de gás.

Os limites de flamabilidade são chamados respectivamente de Limite Inferior de Explosividade ou Flamabilidade (*Lower Explosive Limit* (LEL) ou *Lower Flammable Limit* (LFL)) e Limite Superior Explosividade ou Flamabilidade (*Upper Explosive Limit* (UEL) ou *Upper Flammable Limit* (UFL)), são os limites que delimitam a concentração da mistura de oxigênio e gás é ideal para que ocorra a combustão. Esses valores para o metano são de LEL = 5% a UEL = 15% e são mostrados na Figura 2.11. Na Tabela 2.2 são apresentados os limites para outros gases.

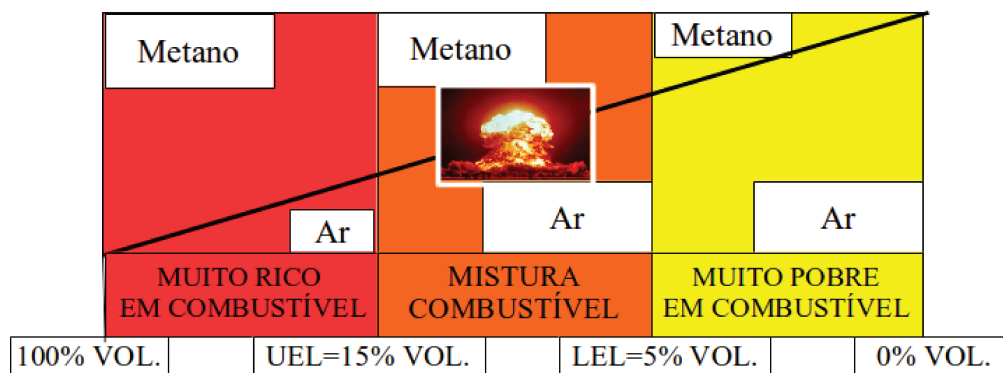


Figura 2.11: Limites de flamabilidade para o metano.

Tabela 2.2: Limites de flamabilidade para alguns gases.

Substância	LFL/LEL (% Vol.)	UFL/UEL (% Vol.)
Monóxido de Carbono	12,50	74,00
Sulfeto de Hidrogênio	4,30	46,00
Etano	3,00	12,50
Propano	2,12	9,30
Butano	1,86	8,40
Pentano	1,40	7,80
Hexano	1,18	7,40

2.4 Fluidodinâmica Computacional (CFD)

A Fluidodinâmica Computacional (*Computational Fluid Dynamics* - CFD) é a modelagem dos processos que envolvem escoamento de fluidos com ou sem transferência de calor e massa, por meio de simulação numérica computacional das equações diferenciais não lineares que regem os fenômenos de transporte. O CFD pode ser muitas vezes tão confiável quanto os experimentos, por isso possui uma vasta gama de aplicações em diversas

áreas do conhecimento desde a engenharia até a área médica. O avanço da capacidade de processamento dos computadores tem contribuído com esse fato.

Um caso de CFD pode ser composto das seguintes etapas:

1. Pré-processamento:

- Definição do volume de controle que será estudado (domínio computacional);
- Modelagem matemática do fenômeno;
- Análise das propriedades físico-químicas relacionadas.

2. Processamento:

- Solução numérica.

3. Pós-processamento:

- Visualização dos resultados.

Essas etapas estão mostradas na Figura 2.12.

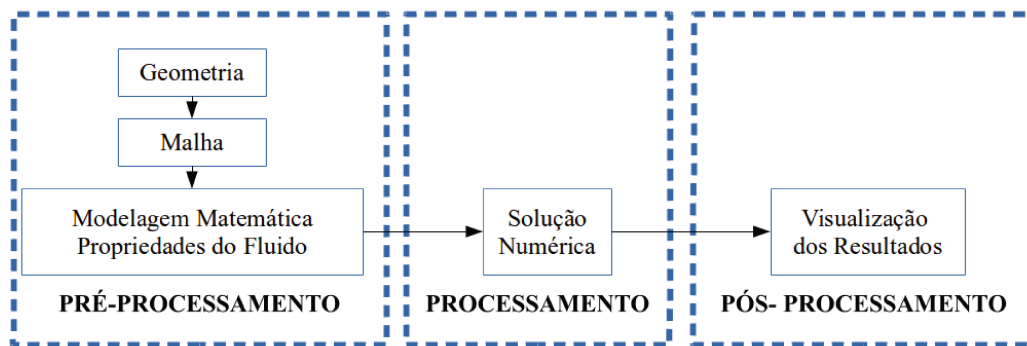


Figura 2.12: Etapas de solução de um problema em CFD.

Após a definição da geometria e do volume de controle, é feita a discretização do volume de controle em células computacionais, que nada mais são do que sub-domínios do volume de controle. A solução das equações que definem o fenômeno de transporte é feita para cada nó contido dentro de cada célula computacional. Logo, a acurácia da solução está diretamente ligada ao número de células, ou seja, ao refinamento da malha. Portanto, quanto maior o grau de refinamento, melhor será a solução. Em contrapartida, gera-se um custo computacional maior, o qual irá impactar no tempo de simulação. Uma forma de contornar essa limitação é o uso de malhas não uniformes, onde são definidas zonas de refinamento

localizadas em regiões desejadas, porém deve ser levado em conta o erro gerado pela parte esparsa da malha. Vale ressaltar também que, para o escoamento transiente a geometria ainda é dividida no domínio temporal para cada passo de tempo.

As equações que descrevem os fenômenos de transporte são equações contínuas no domínio espacial, assim faz se necessário sua discretização para a aplicação da solução numérica. Os métodos de discretização mais utilizados são: Método das Diferenças Finitas (MDF), Método dos Elementos Finitos (MEF) e Método dos Volumes Finitos (MVF), sendo o último o método utilizado pelo *software* OpenFOAM, que será utilizado neste trabalho.

Após a definição das condições iniciais e de contorno, o caso é resolvido através dos seguintes passos: aplicando o método dos volumes finitos é feita a integração das equações diferenciais em cada volume de controle, aplicando o Teorema de Gauss são obtidas as equações algébricas linearizadas. As matrizes dos coeficientes das equações linearizadas são resolvidas por meio de um método matemático apropriado como Gauss-Seidel, por exemplo. Após a etapa de solução vem o pós-processamento onde os resultados podem ser visualizados e analisados.

A solução numérica também é factível de erros, os quais podem ser causados por: erros relacionados ao truncamento numérico, pouca sensibilidade da malha, erro na modelagem matemática (simplificações, condições de contorno inadequadas) e erro de convergência numérica.

Existem vários programas de CFD, sendo alguns comerciais e outros livres. Dentre os comerciais os mais populares são: ANSYS-CFX, ANSYS Fluent e Star-CCM+. Já entre os livres, um dos mais conhecidos é o OpenFOAM. Os primeiros, por receberem mais investimentos, podem ter códigos bem desenvolvidos, interface gráfica, além de vasta documentação, entretanto seus códigos são fechados. Já os livres são distribuídos de forma gratuita e permitem acesso ao código fonte, sendo possível ao usuário customizá-los, porém não possuem documentação completa. Dificultando seu uso e difusão pelos usuários.

Capítulo 3

Trabalhos na Área de Dispersão

Neste capítulo serão discutidos alguns trabalhos experimentais e numéricos, abordando jatos e dispersão. De forma a levantar informações e referências para o desenvolvimento da metodologia descrita neste trabalho.

Dentre os trabalhos que abordam jatos, Birch *et al.* (1984) analisaram a formação e decaimento de jatos de metano para uma ampla faixa de pressões. Através do monitoramento do decaimento da concentração ao longo da linha central do jato, estes autores desenvolveram correlações para o perfil de decaimento da concentração. O esquema do aparato experimental pode ser visto na Figura 3.1. Birch *et al.* (1987) também desenvolveram experimentos de vazamento de ar com formação de jato. Para uma vasta gama de pressões, estes autores monitoraram a velocidade ao longo da linha central do jato e desenvolveram correlações para o perfil de velocidade.

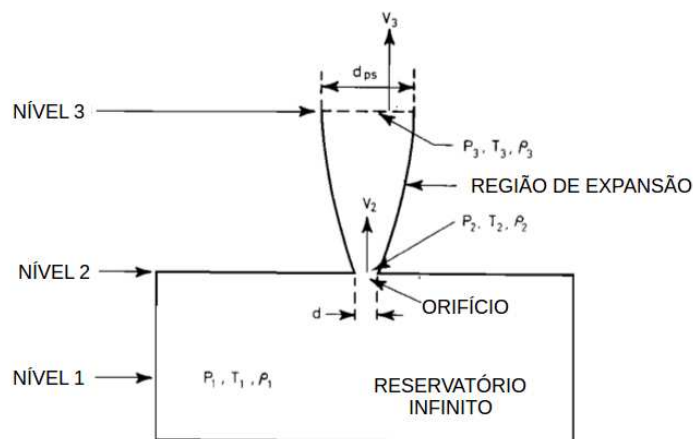


Figura 3.1: Diagrama esquemático do experimento de jato supercrítico (Adaptado de Birch *et al.* (1984)).

Nesse mesmo sentido, Chuech *et al.* (1989) reproduziram os experimentos de

Birch *et al.* (1984) e Birch *et al.* (1987). Porém, com o uso de aparatos mais sofisticados conseguiram caracterizar uma região mais próxima da saída do jato, estes também obtiveram um equacionamento para o cálculo do decaimento de jatos.

Nos três trabalhos citados anteriormente, utilizou-se orifício de vazamento circular. Assim sendo feita a análise de jatos axissimétricos. Segundo Wakes *et al.* (2002), a maior parte dos trabalhos na área de segurança industrial utilizam esta abordagem para jatos. Entretanto, o tamanho e formato do orifício influenciam o perfil do fluxo do jato. Logo, estes autores realizaram experimentos com diferentes formatos de ruptura de flanges e analisaram o decaimento do jato formado. As conclusões que Wakes *et al.* (2002) chegaram foram:

- O uso de jatos axissimétricos para simular vazamentos em estruturas *offshore*, com finalidade de análise de risco, deve ser utilizada com cautela, pois as características de um jato como: decaimento da velocidade na linha central, tamanho do núcleo potencial e do ângulo de espalhamento, estão diretamente ligadas ao formato e dimensão do orifício gerador do jato.
- A análise por meio de jato axissimétrico pode subestimar o volume da nuvem de gás inflamável, pois nos experimentos o ângulo de espalhamento e o arraste de ar foram maiores do que na abordagem axissimétrica.

Ainda tratando da área experimental, tem-se os experimentos de dispersão de grande porte. Que tem por intuito a obtenção de dados para determinação de zonas de risco. Como o experimento *Mock Urban Setting Test* (MUST) que visa a obtenção de dados de dispersão de gases tóxicos e/ou inflamáveis em condições atmosféricas reais.

O experimento de MUST foi desenvolvido no *Army Dugway Proving Ground* (DPG) *Horizontal Grid test*, que está localizado no deserto de Utah. Nesta região a predominância de vegetação de pequeno porte, típica do deserto. Foram realizados testes de vazamento contínuos e do tipo *puff*. A direção predominante do vento era sudeste-noroeste com velocidade média de 3 m/s.

O MUST foi projetado para simular a dispersão em ambiente urbano. Assim foi construída uma pequena área com o uso de *containers* de 12,2 m de comprimento por 2,4 m de profundidade e 2,5 m de altura. Sendo que o vazamento foi realizado no centro da área de estudo, como pode ser verificado na Figura 3.2 (Biltoft *et al.* (2001)).

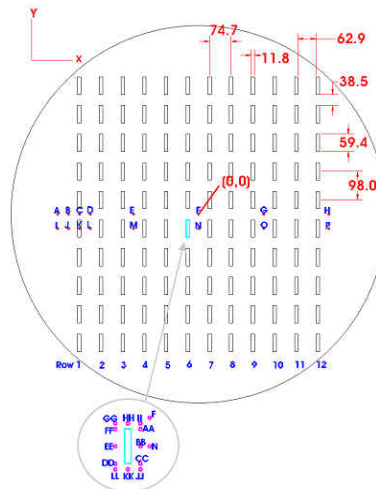


Figura 3.2: Diagrama esquemático do experimento MUST (o detalhe mostra onde ocorreu o vazamento). Fonte: <http://mech.utah.edu/pardyjak/exdata/MUST.php>

Foram alocados detectores de gás, geradores de imagem infravermelho e equipamento meteorológico, como pode ser verificado na Figura 3.3.



Figura 3.3: Foto do experimento MUST. Fonte: <http://mech.utah.edu/pardyjak/exdata/MUST.php>

Os gases foram vazados em diferentes direções e a diversas taxas, foram realizados 68 experimentos, sendo 63 contínuos e 5 de *puff*. Em todos os testes foi avaliada a concentração, onde foram alocados quatro arcos de monitoramento nas distâncias de 25, 60, 95 e 120 metros (Hanna *et al.* (2004)).

Outro experimento desta magnitude é o *Kit Fox* que foi desenvolvido pelo *Desert Research Institute* (DRI) e o *Western Research Institute* (WRI) no *Nevada Test Site*. Todo o experimento foi projetado de forma a reproduzir 1/10 de um ambiente industrial em escala real (Hanna e Chang (2001)). Para tal propósito, dois níveis de obstáculos foram empregados um maior chamado de ERP (*Equivalent Roughness Pattern*), com altura de 2,4 m e um menor o URA (*Uniform Roughness Array*) com altura de 0,2 m.

Todos os experimentos foram realizados ao anoitecer, pois é quando a condição atmosférica mais estável ocorre, a velocidade média do vento era de 2,5 m/s. O *Kit Fox*

englobou um total de 52 experimentos, sendo que destes, 6 foram em ERP e 12 URA com vazamento tipo pluma, 13 ERP e 21 URA com vazamento tipo *puff*.

O gás vazado foi o CO₂ sendo que a fonte de vazamento se localizava ao nível do solo a partir do centro da matriz de obtáculos. Quatro arcos de monitoramento foram utilizados para medir a concentração do gás nas distâncias de 25, 50, 100 e 225 metros. Medidores meteorológicos foram alocados em diferentes alturas: MET1=24m, MET2=4,9m, MET3=8m e MET4=4,9m (Hanna e Chang (2001)).

Nessa mesma linha o experimento de *Prairie Grass* tornou-se um banco de dados padrão utilizado para avaliação de modelos de pluma em superfície lisa. O teste foi desenvolvido em um campo agrícola, em que a vegetação foi aparada. Foram realizados vazamentos de gases neutros, sendo a fonte um pequeno tubo de 0,46 m de altura. Os experimentos foram um total de 43, os quais foram executadas em diferentes condições de estabilidade atmosférica e com vento de 5 m/s. Em todos os testes foi avaliada a concentração na altura de 1,5 m, onde foram alocados cinco arcos de monitoramento nas distâncias de 50, 100, 200, 400 e 800 metros (Hanna *et al.* (2004)).

No que tange os trabalhos computacionais relacionados a dispersão de gás, a grande maioria utiliza *softwares* comerciais. Como é o caso do trabalho desenvolvido por Rigas e Sklavounos (2004), no qual os autores testaram vários modelos de turbulência na análise da dispersão de gases em ambientes com obstáculos, o *software* utilizado foi o CFX 5.6, as abordagens utilizadas foram: κ -epsilon, κ -omega, κ -omega SST e o SSG *Reynolds*. Os autores chegaram a conclusão que os modelos κ -epsilon, κ -omega SST e SSG obtiveram resultados com boa concordância com os resultados experimentais, sendo que os modelos κ -epsilon, κ -omega SST chegaram a valores mais conservadores do perfil de concentração do gás. O modelo SSG exigiu alto custo computacional e não obteve resultados tão acurados quanto os dos dois modelos citados anteriormente. Já a abordagem κ -omega subestimou o perfil de decaimento da concentração do gás, corportamento este que não é desejado em se tratando de segurança industrial.

Gant e Ivings (2005) compilaram em um relatório de pesquisa, o volume de nuvens de gás inflamável geradas por jatos de gás natural com tamanhos de furos distintos, bem como, diferentes pressões de armazenamento. As simulações foram realizadas com utilização da ferramenta CFX e o volume de nuvem inflamável obtido por meio da simulação foi comparado com aquele obtido através da metodologia para o cálculo da nuvem dado pela norma BS EN 60079-10:2003. O que o autores concluíram é que os resultados CFD são bem menores do que aqueles calculados pela norma, entretanto os resultados da simulação ainda necessitam ser validados por meio da comparação com dados experimentais.

Também analisando o efeito de diferentes modelos de turbulência (κ -epsilon e κ -omega SST) em malhas piramidais e híbridas, Baraldi *et al.* (2008) validaram jatos de hélio, por meio de simulação CFD e comparação com dados experimentais. Todos os testes apontaram que o modelo κ -omega SST é mais preciso e simula melhor a região dentro do jato. A abordagem κ -epsilon teve custo computacional maior e foi menos acurada, principalmente em regiões próximas a parede. Logo o modelo κ -omega SST é o mais indicado na simulação de jatos, sendo que a malha que apresentou melhor resultado foi a híbrida. A simulação foi desenvolvida no *software* ANSYS-CFX 5.7.

Como forma de analisar a eficiência da ventilação em ambientes fechados, onde é possível a ocorrência de vazamento de gás com formação de nuvem inflamável, Ivings *et al.* (2010) realizaram as simulações CFD utilizando o *software* ANSYS-CFX 11.0. Foram simulados pequenos jatos de metano, em diversas posições e taxas de vazamento em ambiente fechado com ventilação. As conclusões obtidas foram:

- A concentração média do gás na saída da ventilação deve ser utilizada para avaliar a eficiência da renovação do ar.
- Na presença de obstáculos ocorre recirculação de gás o que gera nuvens maiores e a ventilação pode ser ineficiente para dispersar o vazamento.
- Em regiões onde não há obstrução significativa a dispersão e formação da nuvem possuem comportamento similar à uma emissão em ambiente aberto.

No estudo e análise de nuvem inflamáveis, Qiao e Zhang (2010) criaram uma metodologia para utilização do *software* FLACS para quantificar nuvens de gás inflamável em plataformas de petróleo *onshore* e *offshore*. Sendo os parâmetros cruciais desta análise: taxa, posição e direção de vazamento, bem como, velocidade e direção da ventilação, pois estas variáveis são determinantes para a evolução da nuvem e sua interação com os obstáculos. Este estudo é útil no projeto de sistemas de combate à incêndio e no reforço de estruturas em áreas com risco de explosão.

No mesmo sentido, Tauseef *et al.* (2011) desenvolveram um trabalho com o objetivo de simular o pior cenário de vazamento de gás, o qual gerará a nuvem de gás inflamável mais destrutiva. Para isso, foram simulados vários cenários de vazamento, variando velocidade do vento e taxa de GLP vazada. A partir da situação mais crítica foi realizado o estudo da explosão da nuvem inflamável. As simulações foram realizadas no *software* ANSYS Fluent, os resultados foram comparados com modelos implementados no *software* PHAST e tiveram boa concordância. Estes resultados podem ser empregados na etapa de projeto para análise

de risco em plantas industriais.

Já em trabalhos com o uso de ferramentas abertas, Dixon (2012) validou a utilização do *solver PDRFoam* para simulação de dispersão de gás em plataforma de petróleo. Este *solver* faz parte do *software* OpenFOAM. A metodologia utilizada foi de customização do *solver* para ser executado em regime estacionário e comparação com dados experimentais. As conclusões a que o autor chegou foram:

- O OpenFOAM se mostrou eficiente e confiável na simulação de dispersão de gás, pois os resultados foram similares aos experimentais.
- O *solver PDRFoam* teve bons resultados com diferentes tipos de malha, inclusive em malhas com refinamento localizado.
- Os resultados do OpenFOAM foram semelhantes aos obtidos pelo *software* comercial ANSYS-CFX.

Também utilizando o *software* livre OpenFOAM, Mack e Spruijt (2013) desenvolveram um trabalho investigativo para validação da customização do *solver reactingFoam* para a simulação da dispersão de gases densos. Para atingir este objetivo vários testes foram desenvolvidos, como:

- Análise do escoamento laminar.
- Estudo da capacidade de tratamento da turbulência pela abordagem κ -epsilon aplicada a escoamentos de gases.
- Comparação código a código com a ferramenta comercial ANSYS Fluent.

O *solver* também foi testado para simulação de dispersão em grande escala e em condições atmosféricas reais. Para tal, foram realizadas simulações com vazamento de dióxido de carbono, estes resultados foram comparados com dados experimentais e obtidos via ANSYS Fluent. As conclusões que os autores chegaram foram que:

- A customização foi eficiente para simular a dispersão de gases densos.
- A abordagem $\kappa - \varepsilon$ se mostrou adequada para resolver o fluxo turbulento em comparação com dados experimentais.
- O OpenFOAM obteve resultados tão precisos quanto a ferramenta comercial ANSYS Fluent.

Mais recentemente Ferreira e Vianna (2014) geraram um modelo matemático para o cálculo da nuvem de gás inflamável, por meio de análise estatística dos resultados obtidos pelo *software* ANSYS-CFX. O trabalho destes autores também englobou a validação de jatos de ar e metano e o estudo das variáveis de interesse no fenômeno de dispersão de gás natural em condições atmosféricas reais em plataformas *offshore*.

Através da análise destes trabalhos, percebe-se a complexidade da realização de estudos experimentais na área de dispersão de gás. E que há uma gama de trabalhos numéricos, os quais utilizam em sua maioria *softwares* comerciais. Logo há muito para ser explorado na utilização de *software* livres para simulação e modelagem deste fenômeno, o qual é de extrema importância no projeto e no gerenciamento de riscos em plataformas de petróleo.

Capítulo 4

Metodologia para Dispersão de Gás Utilizando o *Solver reactingFoam*

Neste capítulo serão apresentados o OpenFOAM, o qual foi selecionado por ser uma ferramenta livre e gratuita, a customização implementada no *solver reactingFoam*, que foi utilizado por já conter em seu código as equações que devem ser resolvidas no sentido de modelar o fenômeno da dispersão de gás e a modelagem matemática.

Além disto, também serão mostradas a geração de geometria e malha, condições iniciais e de contorno adotadas, escolha dos métodos numéricos e controle da simulação. Isto posto, o que se desenvolveu nesta etapa foi um procedimento de simulação de dispersão de gás, o qual foi validado por meio de simulação de jatos de gás na região próxima a liberação para as condições subsônica e sônica de escoamento. A metodologia será explicada em mais detalhes nos tópicos a seguir.

4.1 OpenFOAM

O OpenFOAM (*Open Source Field Operation and Manipulation*) é um *software* de CFD de domínio público, ou seja, é livre, possui código aberto sendo este em linguagem C++. A linguagem C++ é usada para criar executáveis, que estão distribuídos em três categorias: *solvers*, bibliotecas e utilitários, como pode ser visto na Figura 4.1. Os *solvers* são projetados para resolver problemas de fenômenos de transporte, os *utilitários* compreendem as ferramentas de pré e pós processamento e as *bibliotecas* dão suporte aos *solvers* e utilitários. A distribuição do OpenFOAM contém uma gama de *solvers* que podem ser aplicados a uma grande quantidade de problemas (OpenFOAM (2014a)). Estes são casos

tutoriais que podem ser modificados pelo usuário. A etapa de pós-processamento do caso é feita por meio de outro *software* o ParaView, que também é gratuito e livre. Mais detalhes sobre este *software* serão apresentados na seção 4.1.3.

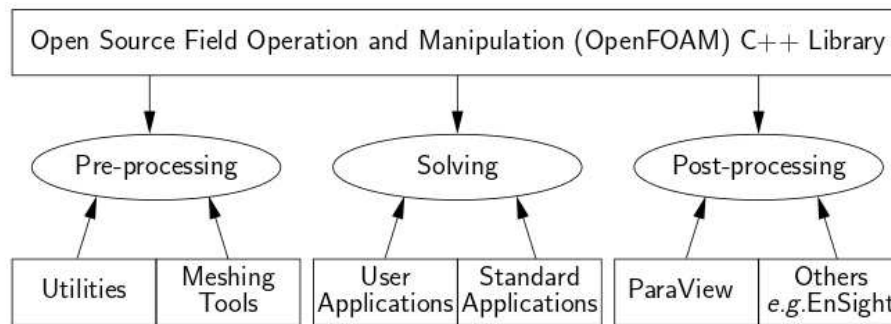


Figura 4.1: Visão geral da estrutura do OpenFOAM (OpenFOAM (2014a)).

Os casos no OpenFOAM devem ter uma estrutura básica para que possam ser executados. Dentro do diretório do caso devem estar contidos três outras pastas: *time*, *constant* e *system* como pode ser visualizado na Figura 4.2. Na pasta *time* (0) estão contidas as condições iniciais e de contorno do problema em questão para cada campo em estudo (pressão, velocidade, etc.). Em *constant* ficam armazenados os dados relativos a geometria e malha, bem como as propriedades. E na pasta *system* ficam todos os dados relacionados ao controle da simulação, como passo de tempo, esquemas numéricos e controle do algoritmo. Todos estes dados são dispostos em arquivos de texto.

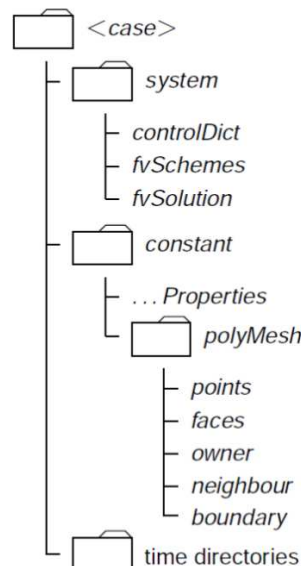


Figura 4.2: Estrutura de um caso em OpenFOAM. (OpenFOAM (2014a)).

A estrutura do caso criado para a dispersão de gás é apresentado na Figura 4.3. Como pode ser observado a primeira etapa consiste na criação da geometria e malha e os arquivos

que devem ser modificados ou adicionados ao caso. Na segunda é executada a customização das propriedades, após são selecionadas as condições de contorno para cada variável em estudo e por último é feita a customização dos arquivos de controle da simulação. Na última etapa é feito o pós-processamento com extração de dados e análise dos resultados.

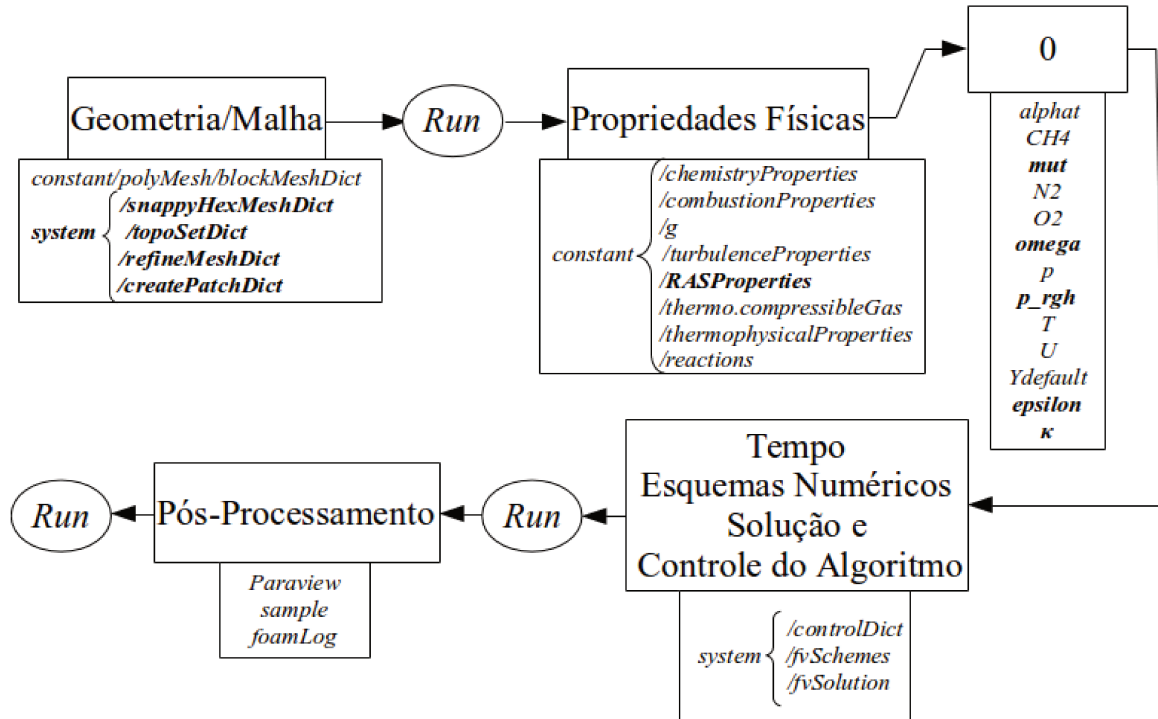


Figura 4.3: Fluxograma da simulação.

4.1.1 Pré-Processamento

O primeiro passo de uma simulação em CFD é a definição da geometria e da malha, o OpenFOAM possui dois geradores nativos de malha. O *blockMesh* e o *snappyHexMesh*.

O *blockMesh* é uma ferramenta que gera malhas hexaédricas multiblocos. Para a criação da malha o usuário deve especificar os vértices em coordenadas cartesianas. A principal limitação é a baixa quantidade de recursos para construção, subdivisão e manipulação destes blocos. O padrão do OpenFOAM é a geração de malhas tridimensionais (OpenFOAM (2014a)). As configurações de malha estão localizadas no diretório *polyMesh*, dentro de *constant*. A execução de um comando no terminal vai ler as informações contidas no arquivo *blockMeshDict* e a malha será gerada, assim na pasta *polyMesh* serão escritos os seguintes arquivos que compõem a malha: *points*, *faces*, *owner*, *neighbour* e *boundary*.

A outra ferramenta usada na geração de malhas é o *snappyHexMesh*, este é um

gerador de malhas automático para geometrias complexas e também gera malhas hexaédricas. O uso do *snappyHexMesh* depende da definição da estrutura básica da malha que é feita pelo *blockMesh*. Ele suporta geometrias em STL, as quais devem estar no formato ASCII ou binário. Além disso o *snappyHexMesh* também pode criar geometrias primitivas como caixas e cilindros. Os dois princípios básicos dessa utilidade são:

- **Castellated:** que gera blocos de elementos hexaédricos envolvendo superfícies e refina os elementos perto da superfície.
- **Snapping:** que conforma os elementos que interceptam a superfície.

O *snappyHexMesh* é executado de forma a sobreescrever a malha gerada pelo *blockMesh*. Dentro da pasta *polyMesh* ele reescreve os arquivos de elementos da malha base. Os arquivos que são gerados são: *cellLevel*, *cellZones*, *faceZones*, *level0Edge*, *pointLevel*, *pointZone*, *refinementHistory*, *surfaceIndex*. Diferentemente do *blockMeshDict*, o *snappyHexMeshDict* está localizado no diretório *system*.

As superfícies onde são aplicadas as condições de contorno são chamados de *patches* e são definidos no *blockMeshDict* e no *snappyHexMeshDict*, os quais irão respectivamente escrever e modificar o arquivo *boundary* no qual estão contidas as condições de contorno, estas também podem ser modificadas pelo usuário sem que haja mudança nas características da malha. Para facilitar o *set up* da simulação é comum agrupar condições de contorno aplicadas a diferentes *patches* para reduzir os dados da pasta *0 (tempo)*. Os tipos de condições de contorno utilizadas para dispersão são:

- **wall:** define as funções de parede para condição de contorno, esta condição é o padrão gerado pelo *snappyHexMesh*.
- **patch:** é a condição de contorno livre, que permite ao usuário aplicar condições de entrada/saída. É necessário definir este tipo de condição quando se usa o *snappyHexMesh* a partir do comando *patchInfo*.
- **symmetryPlane:** cria um plano de simetria, foi utilizada em alguns casos para reduzir as células e com isso o tempo de simulação. Esta condição pode ser usada somente para geometrias simétricas.

Há duas formas de executar o refinamento localizado da malha. Através do *snappyHexMeshDict* ou do *refineMeshDict*. Em ambos deve ser delimitada a área onde o refinamento será aplicado, sendo que para uso do utilitário *refineMeshDict*, deve ser especificada a região por meio do arquivo *topoSetDict*.

Na estrutura de um caso em CFD o passo de pré-processamento consiste também na definição das especificações físicas da simulação, mas neste caso isto será discutido na próxima seção 4.1.2, porque antes serão expostos os critérios de escolha do *solver* utilizado nas simulações.

4.1.2 Processamento - *Solver*

Nesta seção serão discutidas as condições de execução do OpenFOAM. O primeiro passo foi a escolha de um *solver* da base de dados do OpenFOAM que fosse adequado para a simulação de vazamento de gás. O *solver* selecionado foi o *reactingFoam*. Este *solver* foi projetado para simular casos de combustão de metano, logo, desligando o processo de combustão seria possível simular um vazamento de gás. O *reactingFoam* é um *solver* compressível e transiente.

Para a construção do caso de dispersão, a primeira modificação realizada no *solver*, foi a desativação da combustão e a mudança do metano de reagente para inerte. A ideia inicial deste trabalho era utilizar o *reactingFoam* em sua versão original. Assim foram realizadas algumas simulações. Como os resultados obtidos não eram fisicamente coerentes, novas alternativas foram propostas, como: a utilização de outros *solvers* do mesmo pacote, mas que possuíam uma modelagem mais robusta. Estes eram o *rhoReactingFoam* o *rhoReactingBuoyantFoam*. O primeiro não difere muito da versão original, apenas utiliza ρ para o cálculo das propriedades termodinâmicas ao invés de ψ como a versão original. Já o segundo além de calcular as propriedades termodinâmicas utilizando ρ , também leva em consideração o efeito do empuxo (*buoyancy*) causado pela gravidade. Como discutido na Seção 2.1 esse efeito é crucial na caracterização do escoamento de gases, assim este foi o *solver* selecionado para a realização de novos testes.

Como os resultados das simulações de jato melhoraram muito com o *solver rhoReactingBuoyantFoam*, este foi selecionado para executar todas as simulações de dispersão. Esta etapa de investigação também foi desenvolvida por Mack e Spruijt (2013) para gases densos e estes chegaram a mesma conclusão com relação a seleção do *solver*.

4.1.2.1 Propriedades

Seguindo o fluxograma da Figura 4.3, a próxima etapa de *set up* é a definição das propriedades, estas foram modificadas para atingir dois objetivos: desativar a combustão e usar o *solver rhoReactingBuoyantFoam*. Todas as variáveis modificadas estão compiladas

nas Tabelas contidas no Apêndice A.2. No arquivo da propriedade *thermo.compressibleGas*, foram removidas as informações dos modelos *janaf* e *sutherland* das espécies químicas que não serão consideradas no processo de dispersão, neste caso CO_2 e H_2O .

O arquivo *RASProperties* não está no caso original, uma vez que o escoamento apresenta o regime laminar. Logo, este arquivo deve ser adicionado ao caso, no qual está contido o modelo de turbulência que será utilizado na simulação. Foram testados dois modelos de turbulência: o modelo κ -epsilon e o modelo κ -omega SST.

4.1.2.2 Condições de Contorno

As condições de contorno são aplicadas na pasta 0. O tipo de condição de contorno é estabelecida com relação ao tipo de *patch* definido no arquivo de malha. Os tipos de condição de contorno no OpenFOAM são as seguintes (OpenFOAM (2014a)):

- **Tipo Básico:** o tipo de *patch* descrito puramente em termos de geometria ou um *link de comunicação* com as condições da pasta zero, as quais foram descritas na seção 4.1.1.
- **Tipo Primitivo:** tipo de *patch* onde pode ser aplicado uma condição numérica, como por exemplo a condição *fixedValue*, que está descrita na Tabela 4.1.
- **Tipo Derivado:** uma condição complexa de *patch*, derivado do tipo primitivo, atribuída a uma variável de campo, como por exemplo a condição *inletOutlet*, na qual existe a combinação de dois tipos de condição de contorno, como pode ser verificado na Tabela 4.1.

Uma descrição mais detalhada das condições utilizadas no caso da dispersão é abordada na Tabela 4.1 (OpenFOAM (2014a)). Tudo que está na coluna “Tipo” são terminologias utilizadas para especificar a condição de contorno e na coluna “Dado especificado” são as terminologias de dado e seu respectivo valor numérico:

Tabela 4.1: Tipos de *Patch*

Tipo	Descrição do campo de <i>patch</i> ϕ	Dado especificado
<i>fixedValue</i>	Valor de ϕ é especificado	<i>value</i>
<i>zeroGradient</i>	Gradiente normal a ϕ é zero	
<i>calculated</i>	Campo de contorno ϕ deriva de outros campos	
<i>totalPressure</i>	A pressão total: $p_0 = p + 1/2\rho U ^2$ é fixada; quando U muda, p é ajustado de acordo	p0
<i>inletOutlet</i>	Muda U e p para <i>fixedValue</i> ou <i>zeroGradient</i> dependendo da direção U	<i>inletValue, value</i>
<i>pressureInletOutletVelocity</i>	Combinação de <i>pressureInletVelocity</i> (quando p é conhecido na entrada, U é avaliado a partir do fluxo normal ao <i>patch</i>) e <i>inletOutlet</i>	<i>value</i>
<i>fixedFluxPressure</i>	Esta condição de contorno é aplicada ao campo de pressão, o qual ajusta o gradiente de pressão de modo que o fluxo de contorno da velocidade coincida com a condição de contorno	<i>value</i>

Nota: U é velocidade e p é pressão.

Como o *solver* é compressível é necessário especificar o arquivo de viscosidade turbulenta *mut* (μ_t). Também para os campos de turbulência são utilizadas condições de contorno específicas para parede.

Já para os arquivos de espécie química (CH_4 , O_2 , N_2) são configuradas as frações mássicas por meio das terminologias descritas na Tabela 4.1. Todas as modificações das condições de contorno estão contidas no Apêndice A.3. No início da simulação em condições reais de engenharia não ocorre vazamento de metano. O vazamento é executado após o escoamento de ar atingir o regime estacionário. Logo que isto ocorre, devem ser modificadas as pastas CH_4 , O_2 , N_2 e U para incluir os dados e iniciar o vazamento de gás.

4.1.2.3 Parâmetros de Simulação

Serão apresentados neste tópico os parâmetros que estão no diretório *system*. Ele é composto de três arquivos: *controlDict*, *fvSchemes* e *fvSolution*, como é mostrado na Figura 4.3. No primeiro, é onde são configurados os parâmetros que controlam o tempo da simulação. No segundo, o usuário pode escolher os métodos de discretização utilizados pelo

MVF, enquanto que no terceiro, ele especifica métodos para a solução de sistemas lineares e a tolerância de erro para as variáveis.

No arquivo *controlDict* é especificado o passo de tempo de descarga dos resultados e passo e tempo da simulação, que é ajustável pelo número de Courant máximo. Com relação ao arquivo *fvSchemes*, são especificadas as condições aplicadas pelo MFV para resolução dos termos das equações de transporte, suas especificações estão compiladas na Tabela 4.2:

Tabela 4.2: Especificações Numéricas

Termo	Esquema Numérico
temporal	<i>Euler</i>
gradiente	<i>Gauss linear</i>
divergente	<i>Upwind</i>
laplaciano	<i>Gauss linear corrected</i>
interpolação	<i>linear</i>
gradiente normal	<i>corrected</i>

A discretização do termo temporal é feita por *Euler*, que é um método de primeira ordem, implícito e limitado. A palavra chave *Gauss* especifica o padrão de discretização para o MVF como sendo de integração *Gaussiana*, a qual requer interpolação da variável do centro da célula para o centro da face, na interpolação da variável da célula para a face aplica-se normalmente o esquema de interpolação linear, que é o CDS (*Central Differencing Scheme*), este é um esquema de segunda ordem não-limitado (OpenFOAM (2014a)).

Como já se sabe, o fenômeno da dispersão é governado principalmente pela convecção. Sendo assim, para obter uma boa resposta, a resolução correta deste termo deve ser feita. Patankar (1980); Ferziger e Peric (1999); Mack e Spruijt (2013) sugerem o uso do esquema *Upwind* para o termo convectivo, assim nos termos divergentes o esquema de interpolação adotado foi o *Upwind*, que é de primeira ordem e limitado. O esquema *Laplaciano* é *correct*, porque as malhas utilizadas possuem não ortogonalidades. Este é um método explícito de correção de não-ortogonalidade, que é de segunda ordem, conservativo e não limitado. Também assumiu-se o mesmo para o gradiente normal à superfície, o qual é avaliado na face da célula.

No arquivo *fvSolution* estão localizados os métodos de resolução dos sistemas lineares. Este arquivo especifica cada *solver* linear que será utilizado para cada equação discretizada (OpenFOAM (2014a)), os que foram utilizados estão demonstrados na Tabela 4.3. Para todas as variáveis foi estipulada uma tolerância residual de 10^{-6} .

Tabela 4.3: Solvers Lineares

Termo	Solver Linear	Descrição
rho	PCG	<i>Preconditioned (bi-)conjugate gradient</i>
p_rgh	GAMG	<i>Generalised geometric-algebraic multi-grid</i>
UIYilklhlepilsonlomega	PBiCG	<i>Preconditioned (bi-)conjugate gradient</i>

Nota: PCG para matrizes simétricas, PBiCG para assimétricas

O método de solução dos sistemas lineares do tipo gradiente conjugado necessita de um pré-condicionador. Os que foram utilizados estão compilados na Tabela 4.4. Já o método geométrico algébrico multi-grid necessita de *smoother*. O mais utilizado é o *GaussSeidel*, este foi utilizado no *solver* linear GAMG. Informações mais detalhadas sobre estas definições podem ser encontradas nos manuais do OpenFOAM: OpenFOAM (2014a,b).

Tabela 4.4: Pré-condicionador dos gradientes conjugados

Termo	Pré-condicionador	Descrição
rho	DIC	<i>Diagonal incomplete-Cholesky (symmetric)</i>
UIYilklhlepilsonlomega	DILU	<i>Diagonal incomplete-LU (asymmetric)</i>

A grande maioria dos *solvers* do OpenFOAM usa os algoritmos *pressure-implicit split-operator* (PISO) ou *semi-implicit method for pressure-linked equations* (SIMPLE). Esses algoritmos são procedimentos iterativos para resolver equações de velocidade e pressão, sendo o PISO utilizado para problemas transientes e o SIMPLE para casos estacionários (OpenFOAM (2014a)). O algoritmo utilizado contido no *solver rhoReactingBuoyantFoam* é o PIMPLE que é uma variação do PISO, permitindo relaxações explícitas de variáveis e implícitas de equações.

4.1.3 Pós-Processamento

O pós-processamento é feito por outro *software* o ParaView. O ParaView é um programa de código aberto e livre. Os usuários do Paraview podem rapidamente construir visualizações para analisar seus dados utilizando técnicas qualitativas e quantitativas, como construção de gráficos, verificação de fluxos por meio de vetores e linhas de corrente, entre outros. A exploração de dados pode ser feita de forma interativa em 3D (ParaView (2014)).

Para a obtenção do volume da nuvem de gás inflamável foram utilizados dois

utilitários providos pelo ParaView. O primeiro deles é o *Iso Volume*, por meio do qual é possível delimitar a zona de flamabilidade, que ocorre entre as faixas de composição molar do metano de 5% a 15%. Como já citado, o OpenFOAM fornece os valores de fração mássica do metano, como o objetivo é calcular o volume da nuvem em metros cúbicos, a transformação é feita através do balanço de massa realizado no ParaView por meio do utilitário *calculator*. Após a seleção da faixa inflamável é necessário calcular a integral do volume, este cálculo também é feito pelo ParaView através da ferramenta *Integrate Variables*.

Outras ferramentas utilizadas para pós-processar o caso foram: o *sample* e o *foamLog*. O *Sample* é usado para alocar pontos de monitoramento na malha, ele compila os resultados para cada passo de tempo em cada ponto. O *foamLog* é executado para isolar o resíduo.

4.2 Modelagem Matemática

O objetivo deste trabalho é utilizar o *solver* da forma como é distribuído. Em consequência disso, a modelagem matemática utilizada já está implementada no código fonte. As equações que governam o fenômeno tem a seguinte forma:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_\phi \quad (4.1)$$

Os quatro termos desta equação são: termo transiente, termo convectivo, termo difusivo e termo fonte, respectivamente nesta sequência. A variável dependente ϕ é uma propriedade específica que pode ser neste caso: fração mássica de espécies químicas, entalpia, temperatura, a componente da velocidade, energia cinética turbulenta ou escala de comprimento de turbulência, o ρ é a densidade. Em consequência disso, o coeficiente de difusão Γ e o termo fonte S assumirão valores diferentes para cada tipo de equação.

Dentro das bibliotecas contidas no OpenFOAM estão as equações que descrevem o fenômeno da dispersão, as quais estão dispostas abaixo:

- **Equação da Continuidade**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (4.2)$$

também conhecida como equação de conservação de massa, esta equação impõe uma restrição que deve ser satisfeita pelo campo de fluxo.

- **Equação de Momento**

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} u) = \nabla \cdot (\mu \nabla u) - \nabla p + \nabla B + \nabla V \quad (4.3)$$

em que: μ é a viscosidade, p é pressão, B é o termo leva em consideração a força de campo (gravidade) e V computa os termos viscosos.

- **Equação de Espécie Química**

$$\frac{\partial(\rho y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} y_i) = \nabla \cdot (\Gamma_i \nabla y_i) + R_i \quad (4.4)$$

em que: y_i é fração mássica da espécie química i e R_i é a geração ou consumo de espécies químicas.

- **Equação de Energia**

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h) = \nabla \cdot (k \nabla T) + S_h \quad (4.5)$$

em que: h é a entalpia específica, k é a condutividade térmica, T é temperatura e S_h é a taxa volumétrica de calor gerado. O primeiro termo do lado direito, representa a transferência de calor por condução dentro do fluido.

4.3 Turbulência

Como descrito no Capítulo 2, o fenômeno da dispersão é diretamente influenciado pela turbulência, assim sendo, além das equações descritas no tópico 4.2 deve ser levada em consideração a abordagem da turbulência, a qual possui as seguintes características (Ferziger e Peric (1999)):

- Fluxos turbulentos são instáveis, nos quais observa-se um comportamento caótico do fluido.
- É tridimensional. Mesmo a velocidade sendo função de duas direções, ela flutua nas três coordenadas espaciais.
- Ocorre a formação de vórtices. Os vórtices são responsáveis pelo mecanismo que aumenta a turbulência.

- Aumento da difusão turbulenta, que ocorre quando substâncias são misturadas por meio de difusão devido ao movimento turbulento.
- Sua característica aleatória faz com que as variáveis tamanho, força e intervalo de tempo entre as ocorrências sejam difíceis de serem mensuradas, assim seu estudo se torna bastante complexo.
- Escoamentos turbulentos oscilam em uma ampla faixa de comprimento e em diferentes escalas. Diante disso, sua simulação exata se torna muito difícil.

Pela dificuldade no estudo e simulação da turbulência foram criados modelos que tentam prever este fenômeno. Alguns deles serão abordados a seguir.

4.3.1 Modelos de Turbulência

Existem seis categorias de modelos para predição do fluxo turbulento, que são (Ferziger e Peric (1999)):

1. O primeiro envolve o uso de correlações. Como por exemplo a correlação para o cálculo do fator de atrito como sendo função do número de Reynolds. Este tipo de correlação é aplicada a fluxos simples e não requer o uso de um computador.
2. O segundo é o método de integração das equações de movimento em uma ou duas direções. É um processo bastante simples, que se reduz a duas ou mais equações diferenciais ordinárias que são de fácil resolução.
3. A terceira é baseada no cálculo do valor médio das equações de movimento ao longo do tempo e na modelagem dos vórtices de turbulência, ou seja, as equações de escoamento são resolvidas e os turbilhões são modelados, a resposta obtida é o perfil médio da variável em estudo. Essa abordagem é aplicada na maioria dos casos de engenharia sendo conhecida como modelagem *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS) ou Equações de Médias de Reynolds.
4. O quarto tipo utiliza correlações dos componentes de velocidade em duas direções ou a transformada de Fourier destas equações. Este método é chamado de fechamento de segunda ordem.
5. O quinto é conhecido como *Large Eddy Simulation* (LES) ou Simulação de Grandes Escalas o qual resolve os grandes turbilhões do fluxo e modela os pequenos. Portanto,

possui uma precisão maior que a abordagem RANS, mais em contrapartida requer uma maior capacidade computacional. A simulação tem que ser transiente.

6. Finalmente o *Direct Numerical Simulation* (DNS) ou Simulação Numérica Direta, no qual todos os vórtices turbulentos são resolvidos. Não é muito utilizado em aplicações de engenharia, pois requer uma capacidade computacional muito alta, são necessárias malhas muito refinadas e passos de tempo pequenos.

As três abordagens utilizadas computacionalmente para tratamento da turbulência estão mostrados na Figura 4.4. É possível verificar o grau de resolução dos turbilhões nas abordagens DNS e LES, já no caso do RANS não há resolução de turbilhões.

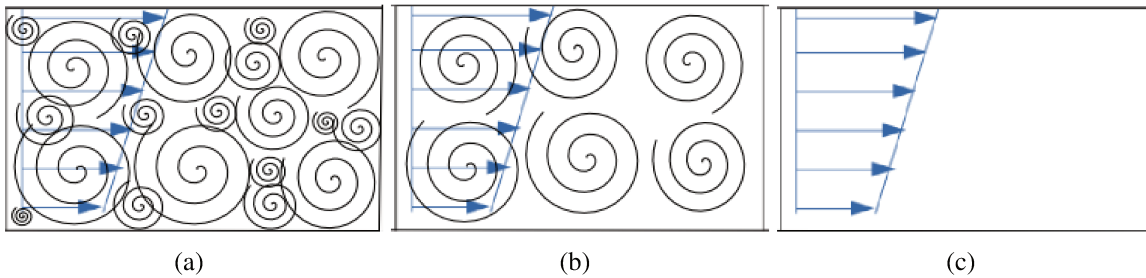


Figura 4.4: Modelos de resolução da turbulência: (a) DNS, (b) LES e (c) RANS.

Para realização deste trabalho foi selecionada a modelagem RANS, por ter custo computacional reduzido e ser bastante empregada em diversas áreas da engenharia. A seguir serão apresentados maiores detalhes da forma de resolução utilizada nesta abordagem.

4.3.2 Modelos RANS - *Reynolds-Averaged Navier-Stokes*

Na abordagem RANS são empregados modelos matemáticos para a predição da mistura e difusão causada pelos vórtices de turbulência. Ao utilizar um modelo de turbulência, a equação de Navier-Stokes é substituída pela Equação de Médias de Reynolds (RANS), na qual é introduzido o termo conhecido como tensão de Reynolds (τ_{ij}), que representa a influência das flutuações turbulentas no fluxo médio (Çengel e Cimbala (2006)).

Este tensor de Reynolds é modelado por meio de modelos de turbulência. Existem muitos modelos, estes são classificados como: algébricos, de uma equação, de duas equações e modelos de *stress* de Reynolds. Os mais utilizados são: o modelo $\kappa - \varepsilon$ e o modelo $\kappa - \omega$. Esses são modelos de duas equações, ou seja, adicionam mais duas equações de transporte, as quais devem ser resolvidas simultaneamente com as equações de massa e quantidade de

movimento (e também de energia se estiver sendo utilizada) (Çengel e Cimbala (2006)). A seguir, será abordado com maiores detalhes os modelos que serão utilizados neste trabalho.

4.3.2.1 Modelo de Turbulência κ -epsilon ($\kappa - \varepsilon$)

A turbulência é caracterizada basicamente por dois parâmetros: a energia cinética κ e a escala de comprimento ε , as quais são calculadas por equações diferenciais. A viscosidade turbulenta pode ser definida por (Malalasekera e Versteeg (1995)):

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (4.6)$$

e o modelo κ -epsilon utiliza as seguintes equações para κ e ε :

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\kappa\mathbf{U}) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \nabla \kappa \right] + 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \rho\varepsilon \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\varepsilon\mathbf{U}) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{\kappa} \quad (4.8)$$

sendo que os termos de ambas as equações podem ser descritos em sequência como:

1. Taxa de mudança de κ ou ε ;
2. Transporte de κ ou ε por convecção;
3. Transporte de κ ou ε por difusão;
4. Taxa de produção de κ ou ε ;
5. Taxa de destruição de κ ou ε .

As constantes do modelo são:

$$C_\mu = 0,09; C_{1\varepsilon} = 1,44; C_{2\varepsilon} = 1,92; \sigma_\kappa = 1,0; \sigma_\varepsilon = 1,30.$$

Sendo que a constante C_μ é utilizada para o cálculo da viscosidade turbulenta. Os números de Prandtl σ_κ e σ_ε conectam as difusividades de κ e ε à viscosidade turbulenta μ_t . E as constantes $C_{1\varepsilon}$ e $C_{2\varepsilon}$ permitem a correção proporcional entre os termos das equações κ e ε .

Este modelo possui algumas vantagens e desvantagens, a saber (Malalasekera e Versteeg (1995)):

Vantagens:

1. É um modelo de turbulência simples, o qual são necessárias a definição de condições iniciais ou de contorno;
2. Boa performance para uma vasta gama de aplicações em engenharia;
3. Bem estabelecido e validado para inumeros casos.

Desvantagens: A principal desvantagem é a incapacidade de resolver o campo da velocidade real. Assim, tendo baixa capacidade de resolução de uma boa quantidade de aplicações importantes como:

1. Fluxos livres;
2. Fluxos com grande tensor extra: camada limite curvas, fluxos turbilhonares;
3. Fluxos rotativos;
4. Erro na predição do ângulo de espalhamento de jatos axissimétricos;

4.3.2.2 Modelo de Turbulência κ -omega ($\kappa - \omega$)

A abordagem com base na equação ε , possui uma resolução menos acurada em regiões próximas a parede, principalmente em paredes lisas. Em contrapartida, a modelagem ω é mais robusta pois prevê métodos diferentes de resolução para paredes lisas e rugosas (Malalasekera e Versteeg (1995)).

Na abordagem κ -omega a viscosidade turbulenta está ligada a energia cinética turbulenta e a frequência turbulenta pela relação:

$$\mu_t = \frac{\kappa \rho}{\omega} \quad (4.9)$$

E o modelo $\kappa - \omega$ utiliza as seguintes equações para κ e ω :

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\kappa \mathbf{U}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \nabla(\kappa) \right] + P_\kappa - \beta^* \rho \kappa \omega \quad (4.10)$$

onde:

$$P_\kappa = \left(2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \frac{2}{3} \rho \kappa \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \right) \quad (4.11)$$

é a taxa de produção de energia cinética turbulenta.

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\omega \mathbf{U}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \nabla(\omega) \right] + \gamma_1 \left(2\rho S_{ij} \cdot S_{ij} - \frac{2}{3}\rho\omega \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \right) - \beta_1 \rho \omega^2 \quad (4.12)$$

em que:

$$\sigma_\kappa=2,0; \sigma_\omega=2,0; \beta_1=0,075; \beta^*=0,09; \gamma_1=0,553.$$

4.3.2.3 Modelo de Turbulência κ -omega SST ($\kappa - \omega$ SST)

O modelo κ -omega SST se utiliza das maiores vantagens dos modelos κ -epsilon e κ -omega. Assim sendo, esta abordagem é um modelo híbrido, o qual utiliza-se da transformação do modelo κ -epsilon em κ -omega em regiões próximas a parede e a abordagem padrão κ -epsilon na região de fluxo livre. A computação do tensor de Reynolds na equação κ é a mesma do modelo original de κ -omega, entretanto a equação de ε é transformada na equação de ω pela substituição $\varepsilon = \kappa\omega$. Neste modelo a viscosidade turbulenta é modelada por meio da energia cinética turbulenta κ e a taxa de dissipação específica da energia cinética turbulenta por ω (Malalasekera e Versteeg (1995)).

Este modelo nos escoamentos com camada limite se mostra superior ao κ -epsilon, pois resolve melhor a região viscosa próxima a parede. Também possui boas respostas em problemas com gradiente adversos de pressão (Malalasekera e Versteeg (1995)).

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\kappa \mathbf{U}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \nabla(\kappa) \right] + P_\kappa - \beta^* \rho \kappa \omega \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\omega \mathbf{U}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega,1}} \right) \nabla(\omega) \right] + \gamma_2 \left(2\rho S_{ij} \cdot S_{ij} - \frac{2}{3}\rho\omega \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \right) - \beta_2 \rho \omega^2 + 2 \frac{\rho}{\sigma_{\omega,2}\omega} \frac{\partial \kappa}{\partial x_\kappa} \frac{\partial \omega}{\partial x_\kappa} \quad (4.14)$$

Analisando as equações 4.12 e 4.14 pode ser observado a adição de um termo na Equação 4.14, chamado de termo de difusão cruzada, o qual surge da transformação $\varepsilon = \kappa\omega$ no termo difusivo da equação de ε .

As constantes deste modelo são:

$$\sigma_\kappa=1,0; \sigma_{\omega,1}=2,0; \sigma_{\omega,2}=1,17; \beta_2=0,083; \beta^*=0,09; \gamma_2=0,44.$$

São utilizadas funções de mistura para evitar instabilidades numéricas causadas pelos valores computados pela viscosidade turbulenta, próxima a região de parede e na região de fluxo livre. Através da Equação 4.15 é resolvida a condição de transição entre estas condições.

$$C = C_1 F_C + C_2 (1 - F_C) \quad (4.15)$$

A viscosidade turbulenta é limitada no sentido de aumentar a performance do modelo em fluxos com gradientes de pressão adversos e a produção da energia cinética turbulenta é limitada para prevenir o aumento da turbulência em regiões estagnadas (Malalasekera e Versteeg (1995)).

$$\mu_t = \frac{a_1 \rho \kappa}{\max(a_1 \omega, S F_2)} \quad (4.16)$$

$$P_\kappa = \min \left(10 \beta^* \rho \kappa \omega, 2 \mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \frac{2}{3} \rho \kappa \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \right) \quad (4.17)$$

Tanto a abordagem κ -epsilon quanto a κ -omega não levam em consideração a tensão de cisalhamento turbulenta, ocasionando uma superestimação da viscosidade turbulenta. Esta propriedade de transporte é modelada na abordagem κ -omega SST. Por isso, a modelagem κ -omega SST tende a ser mais robusta para aplicação em dispersão de gás em geometrias complexas (Rigas e Sklavounos (2004)).

4.4 Validação

A modelagem desenvolvida na seção anterior foi utilizada para simular casos encontrados na literatura para possibilitar a comparação e validação do modelo proposto. Os testes desenvolvidos foram:

1. Monitoramento: como este *solver* é transiente, foram alocados alguns pontos de monitoramento para garantir que o escoamento estivesse no estado estacionário na retirada dos dados.

2. Modelo de Turbulência: como forma de garantir a melhor condição de simulação, com relação a estabilidade numérica e acurácia, foram testados dois modelos de turbulência dentre os disponíveis para este *solver*.
3. Análise da Malha: foi realizado o teste de sensibilidade de malha utilizado-se de três níveis de refinamento, para encontrar a malha com melhor convergência e menor custo computacional.
4. Análise do Número de Courant e dos Resíduos: como forma a acelerar o passo de tempo da simulação foram testados três números de Courant (0,8, 5,0, 10,0 para condição subsônica e 0,8, 5,0, 6,0 para a sônica), com isso verificou-se a acurácia da solução, o tempo computacional e a estabilidade numérica. Uma explanação a respeito desta variável será dada na sequência.

O número de Courant também conhecido como *Courant-Friedrichs-Lewy* (CFL) é a condição necessária para manter a estabilidade numérica na resolução de equações diferenciais parciais, assumindo a relação entre tamanho de malha e os erros no método de diferenças finitas em equações hiperbólicas (Courant *et al.* (1967)). No OpenFOAM esta condição é usada para limitar o passo de tempo, de forma a manter a estabilidade do algoritmo PIMPLE, a definição do número de Courant para três dimensões é:

$$C = \frac{u_x \Delta t}{\Delta x} + \frac{u_y \Delta t}{\Delta y} + \frac{u_z \Delta t}{\Delta z} \leq C_{MAX} \quad (4.18)$$

onde: u_n é a magnitude da velocidade que passa pela célula; Δt é o passo de tempo; Δn é o tamanho da célula; C_{MAX} é o número de Courant máximo;

O passo de tempo no *solver rhoReactingBuoyantFoam* é calculado automaticamente pela Equação 4.18, sendo que o usuário deve especificar o Courant máximo, o qual será o parâmetro limitador do tempo.

Na Figura 4.5 está mostrado o fluxograma das variáveis analisadas para validação da customização executada no *solver*.

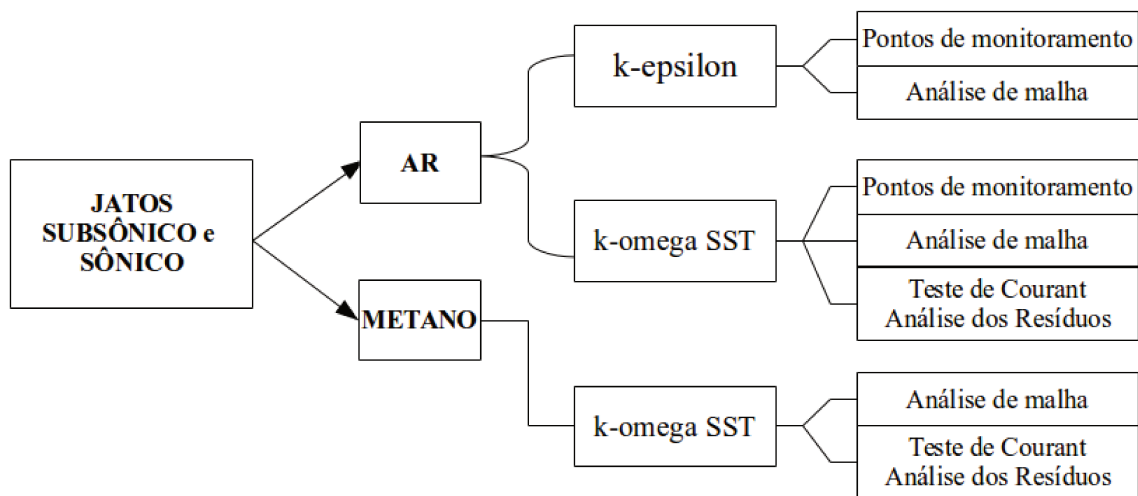


Figura 4.5: Fluxograma dos testes desenvolvidos na etapa de validação do *Solver*.

Capítulo 5

Validação da Metodologia através de Simulação de Jatos Axissimétricos

No sentido de verificar a customização executada no *solver rhoReactingBuoyant-Foam* foram simulados jatos axissimétricos, assim sendo avaliada a região próxima a liberação. Os dados utilizados para a criação da geometria e malha, bem como, a aplicação das condições de contorno foram retirados da literatura.

Neste capítulo, são apresentados os resultados dos testes de modelo de turbulência, sensibilidade de malha, passo numérico e resíduo. Para execução das simulações, utilizou-se um computador Lenovo com UBUNTU 13.10 – Intel® Core™ i7 vPro™ com 8 GB de memória RAM.

5.1 Geometria e Malha

Analisando os experimentos de jatos realizados por Birch *et al.* (1984), Birch *et al.* (1987) e Chuech *et al.* (1989), foi desenvolvido um domínio computacional com as seguintes dimensões: base com 0,1 por 0,05 m e 1,0 m de altura. O diâmetro do orifício nos experimentos era de 2,7 mm. Porém, com o objetivo de reduzir o custo computacional, foi utilizado nas simulações um furo quadrado com 2,4 mm de lado e um corte na cota z, onde utilizou-se da condição de plano de simetria. Na Figura 5.1 pode ser verificado o domínio computacional utilizado.

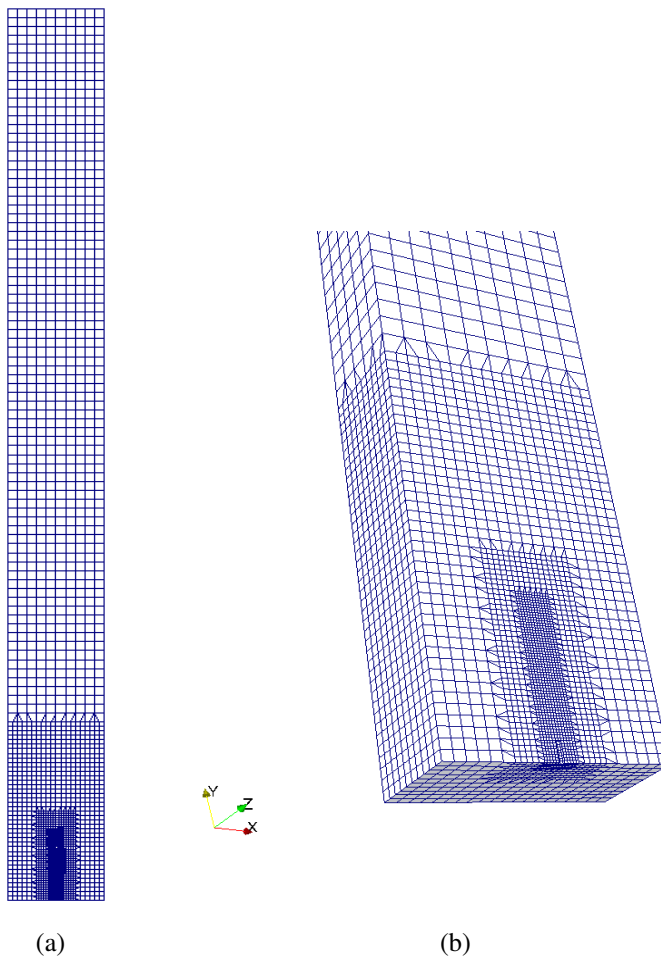


Figura 5.1: Malha utilizada nas simulações de jato das Seções 5.2, 5.3, 5.4 - (a) Dominínio computacional com as seguintes dimensões: base com 0,1 por 0,05 m e 1,0 m de altura - orifício de 2,4 mm de lado , (b) Detalhe do refinamento tamanho da célula - malha base: 8,33 mm, nível 1: 4,17 mm, nível 2: 2,08 mm e nível 3: 1,04 mm.

5.2 Sensibilidade de Malha

No sentido de verificar a independência da malha gerada, foram realizadas simulações de jatos de ar e metano para diferentes condições de emissão. Além disso, foram testadas duas abordagens de turbulência para a modelagem RANS. Os resultados desta análise serão apresentados a seguir.

• Jatos de Ar

Utilizando a geometria e malha demonstradas na Seção 5.1 foram realizadas simulações de jatos. Sendo que para determinar a condição de contorno a ser aplicada na região do vazamento, foi realizada a modelagem termodinâmica do fenômeno de expansão do gás

para estimar a condição no orifício de saída. A classificação da condição de saída do jato depende da pressão e temperatura dentro do reservatório e das características do gás, assim para jatos subsônicos os dados utilizados foram calculados conforme descrito na Seção 2.2.1. Estes dados encontram-se compilados na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Condições de contorno aplicadas no orifício de vazamento para simular jato de ar subsônico

Dados dentro do reservatório		Condição de Contorno aplicada no Orifício de Vazamento	
Variável	Valor/Unidade	Variável	Valor/Unidade
T	291 K	T	260 K
P	1,48 bar	P	1,00 bar
Massa Molar	28,84 g/mol	U	249 m/s (Ma=0,73)
γ (c_p/c_v)	1,40		

Constante universal dos gases - $R=8,314$ J/kg.K

Para a análise de convergência foram utilizadas três malhas, com identificação e respectivo número de elementos conforme disposto na Tabela 5.2. Todas as malhas são não-uniformes, assim possuem níveis de refinamento localizados próximo a saída do jato, este níveis podem ser verificados na Figura 5.1.

Tabela 5.2: Identificação das malhas utilizadas na simulação de jatos de ar

Modelo de Turbulência	Malha	No. de Células
κ -omega SST	Grid_01	11422
	Grid_02	20496
	Grid_03	37628
κ -epsilon	Grid_01	12820
	Grid_02	20496
	Grid_03	25310

Analisando a Figura 5.2, pode ser observado que na simulação de jato de ar subsônico utilizando o modelo κ -omega SST, não há diferença significativa dos resultados para as malhas utilizadas. Além disso, a região de refinamento não influenciou os resultados para este modelo, como pode ser observado nas Figuras 5.2 e 5.3.

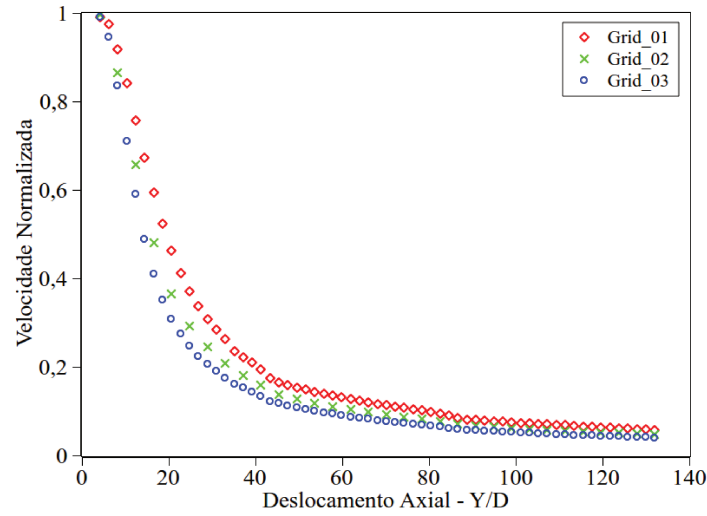


Figura 5.2: Análise de sensibilidade de malha no decaimento da velocidade do jato de ar subsônico - modelo de turbulência κ -omega SST.



Figura 5.3: Velocidade na célula para jato subsônico de ar: modelo de turbulência κ -omega SST - (a) Grid_01, (b) Grid_02 e (c) Grid_03.

Para a abordagem κ -epsilon as malhas utilizadas e suas identificações estão dispostas na Tabela 5.2, como pode ser observado as malhas identificadas como Grid_01 e Grid_03 possuem número de elementos diferentes das utilizadas para a abordagem κ -omega SST. Isto pode ser justificado, pois o objetivo era validar a convergência de malha para este modelo, assim optou-se em apresentar as malhas que obtiveram melhores resultados. Entretanto,

analisando os resultados para o modelo κ -epsilon, que estão apresentados nas Figuras 5.4 e 5.5, pode ser verificado que estas malhas ainda ocasionaram erro na solução, pois não há diferença significativa entre os resultados das malhas Grid_02 e Grid_03.

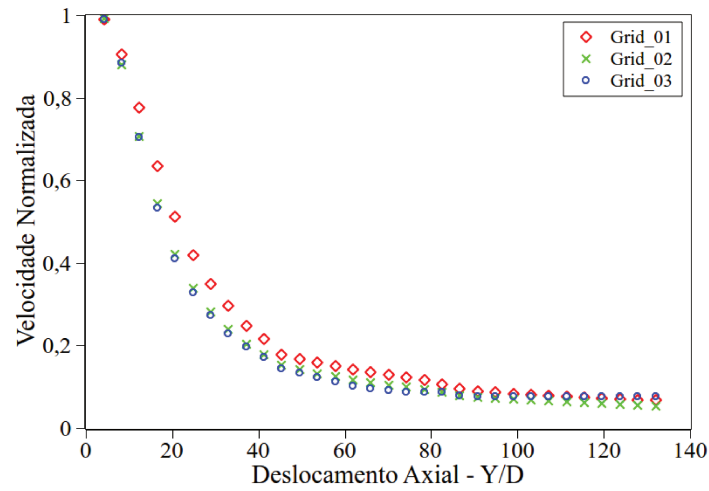


Figura 5.4: Análise de sensibilidade de malha no decaimento da velocidade do jato de ar subsônico - modelo de turbulência κ -epsilon.

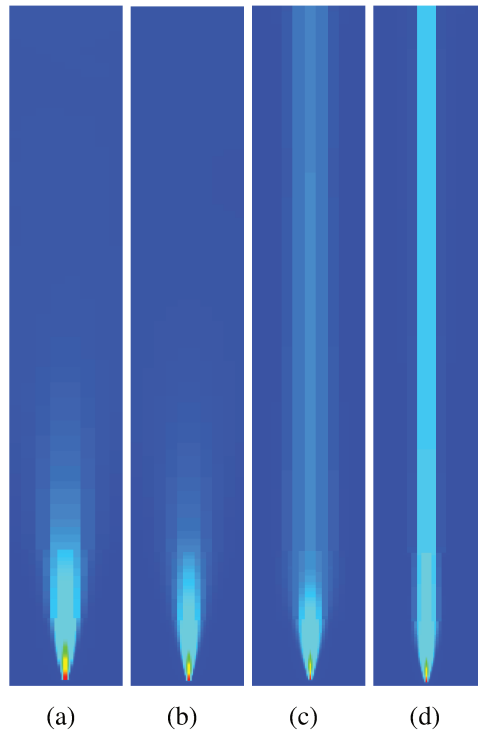


Figura 5.5: Velocidade na célula para jato subsônico de ar: modelo de turbulência κ -epsilon: (a) Malha com 12820 células (Grid_01), (b) Malha com 20496 células (Grid_02), (c) Malha com 25310 células (Grid_03) e (d) Malha com 37628 células.

Com o objetivo de avaliar a capacidade de resolução do *solver*, também foi simulada a condição sônica aplicada ao jato de ar. Utilizando a mesma geometria citada anteriormente,

foi realizada a modelagem da expansão do gás, para gerar a condição de contorno a ser aplicada no orifício de vazamento, conforme descrito na Seção 2.2.2. Estes dados encontram-se compilados na Tabela 5.3.

Tabela 5.3: Condições de contorno aplicadas no orifício de vazamento para simular jato de ar sônico

Dados dentro do reservatório		Condição de Contorno aplicada no Orifício de Vazamento	
Variável	Valor/Unidade	Variável	Valor/Unidade
T	292 K	T	243 K
P	2,48 bar	P	1,30 bar
Massa Molar	28,84 g/mol	U	313 m/s (Ma=1)
γ (c_p/c_v)	1,40		

Constante universal dos gases - $R=8,314$ J/kg.K

Utilizando as malhas especificadas na Tabela 5.2 foi realizada a simulação da condição sônica. Os resultados estão apresentados nas Figuras 5.6 e 5.7. As mesmas características pronunciadas para o jato subsônico foram verificadas.

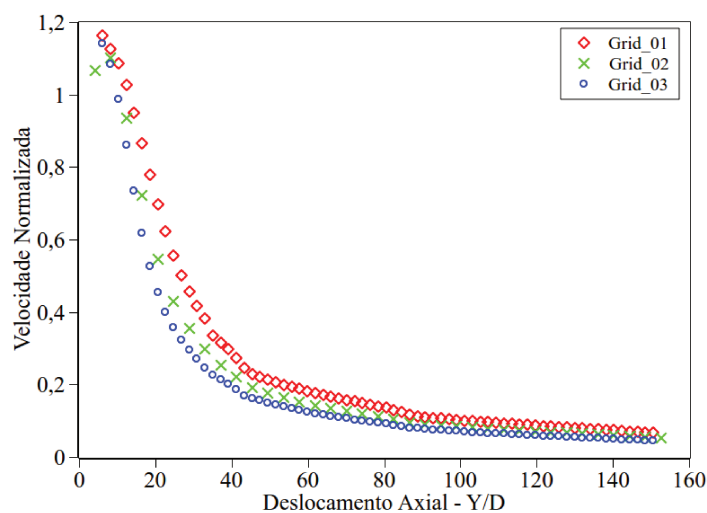


Figura 5.6: Análise de sensibilidade de malha no decaimento da velocidade do jato de ar sônico - modelo de turbulência κ -omega SST.

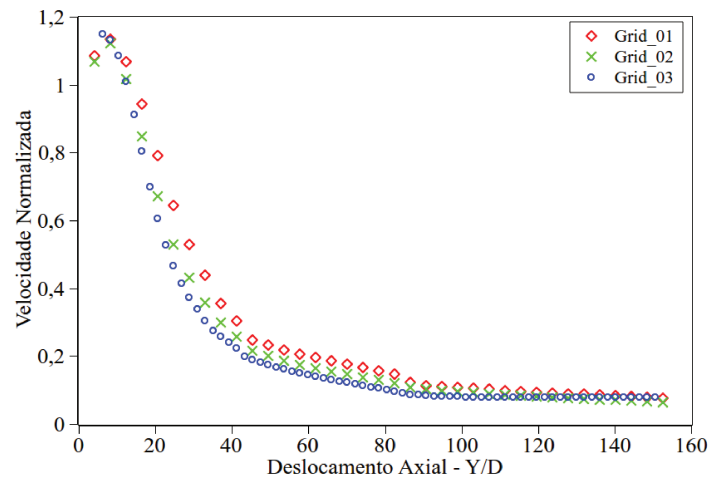


Figura 5.7: Análise de sensibilidade de malha no decaimento da velocidade do jato de ar sônico - modelo de turbulência κ -epsilon.

Com relação aos modelos de turbulência, suas vantagens e desvantagens foram enumeradas na Seção 4.3.2. Conforme Malalasekera e Versteeg (1995) o modelo κ -omega SST tende a ser mais robusto em aplicações em fluxos onde há camada limite com gradientes adversos de pressão, como o que acontece em jatos. Nos trabalhos de Baraldi *et al.* (2008); Rigas e Sklavounos (2004) também foi observado comportamento similar de tais abordagens de turbulência.

• Jatos de Metano

Para avaliar o perfil de decaimento de concentração, a simulação de jatos de metano também foi executada. Assim como, a análise de sensibilidade de malha. Com base no estudo realizado para jatos de ar, foi considerado para estas simulações o modelo de abordagem de turbulência κ -omega SST. A identificação das malhas utilizadas está demonstrada na Tabela 5.4.

Tabela 5.4: Identificação das malhas utilizadas na simulação de jato de metano

Malha	No. de Células
Grid_01	11422
Grid_02	20496
Grid_03	37628

Com a geometria criada foi calculada a condição de contorno aplicada para executar a simulação de jato subsônico, conforme descrito na Seção 2.2.1. Estes dados encontram-se compilados na Tabela 5.5.

Tabela 5.5: Condições de contorno aplicadas no orifício de vazamento para simular jato de metano subsônico

Dados dentro do reservatório		Condição de Contorno aplicada no Orifício de Vazamento	
Variável	Valor/Unidade	Variável	Valor/Unidade
T	288 K	T	260 K
P	1,48 bar	P	1,00 bar
Massa Molar	17,32 g/mol	U	321 m/s
$\gamma (c_p/c_v)$	1,35		

Constante universal dos gases - $R=8,314 \text{ J/kg.K}$

O decaimento da fração molar do metano ao longo da linha central do jato está graficamente demonstrada na Figura 5.8. Analisando a Figura 5.8 possível verificar que não há diferença significativa entre as malhas consideradas.

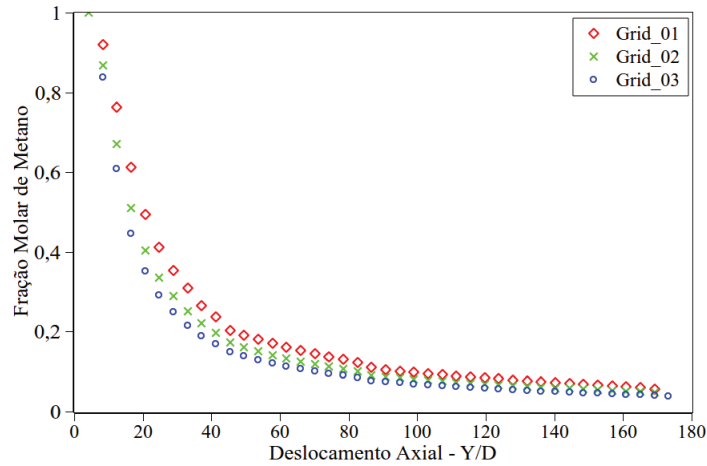


Figura 5.8: Decaimento da fração molar de metano na linha central do jato subsônico em razão a distância normalizada com o diâmetro do furo: análise de sensibilidade de malha (Y= distância axial, D= diâmetro do furo).

A condição de escoamento sônica para o metano também foi levantada. Os dados utilizados como condição de contorno aplicada ao vazamento estão apresentadas na Tabela 5.6.

Tabela 5.6: Condições utilizadas para simular jato sônico de metano

Dados dentro do reservatório		Condição de Contorno aplicada no Orifício de Vazamento	
Variável	Valor/Unidade	Variável	Valor/Unidade
T	288 K	T	245 K
P	3,50 bar	P	1,90 bar
Massa Molar	17,32 g/mol	U	399 m/s
γ (c_p/c_v)	1,35		

Constante universal dos gases - $R=8,314$ J/kg.K

Na Figura 5.9 é possível verificar o decaimento da fração molar de metano para condição de jato sônico, o qual possui perfil semelhante ao observado para jato subsônico.

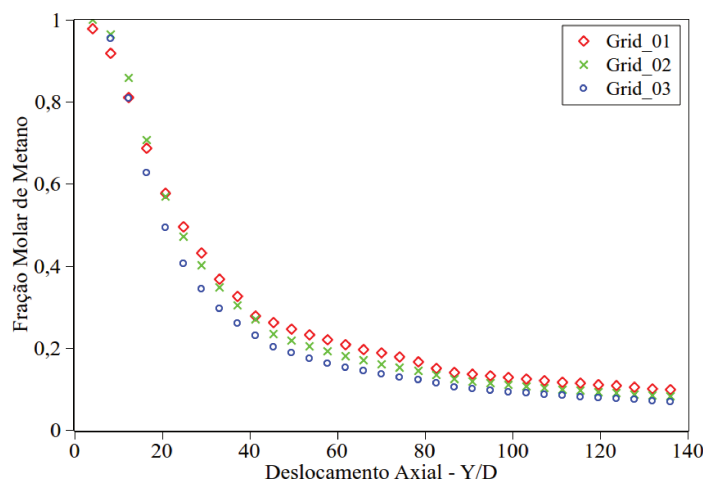


Figura 5.9: Decaimento da fração molar de metano na linha central do jato sônico em razão a distância normalizada com o diâmetro do furo: análise de sensibilidade de malha (Y= distância axial, D= diâmetro do furo).

5.3 Comparação com Jatos Experimentais

Como forma a validar a simulação computacional, a comparação com resultados de jatos experimentais foi realizada. Com uma malha constituída de 20496 elementos o efeito de dois modelos de turbulência foram investigados. Esta malha foi selecionada, pois gerou bons resultados com menor custo computacional, conforme apresentado na Seção 5.2. Com base nos estudos realizados por Mack e Spruijt (2013); Baraldi *et al.* (2008); Rigas e Sklavounos (2004) os modelos κ -epsilon e κ -omega SST foram considerados. A condição de contorno aplicada para simulação dos jatos de ar encontram-se compilados na Tabela 5.1.

A Figura 5.10 mostra o decaimento da velocidade normalizada na linha central do

jato pela distância não-dimensional a partir do orifício de vazamento. Os resultados para os dois modelos de turbulência discutidos anteriormente são apresentados. A análise do gráfico não mostra diferença significativa entre os modelos de turbulência. Também é observada boa concordância com os dados experimentais.

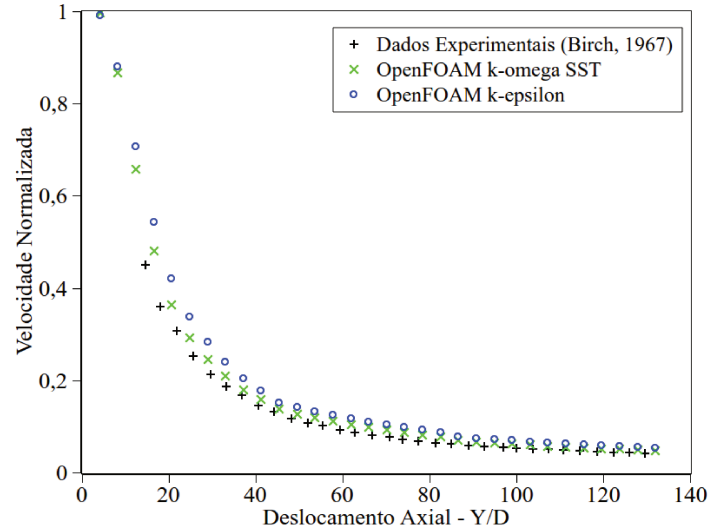


Figura 5.10: Decaimento da velocidade na linha central do jato de ar em razão a distância normalizada com o diâmetro do furo para condição de saída subsônica: teste dos modelos de turbulência (Y= distância axial, D= diâmetro do furo).

O código do OpenFOAM também foi comparado com resultados numéricos obtidos por meio da ferramenta comercial ANSYS-CFX, retirados da literatura. Em ambos os *softwares* foi utilizado o modelo de turbulência κ -epsilon, por ser o mais utilizado em estudos de engenharia. Como pode ser verificado na Figura 5.11 os resultados obtidos pelo OpenFOAM são muito próximos aos da ferramenta comercial.

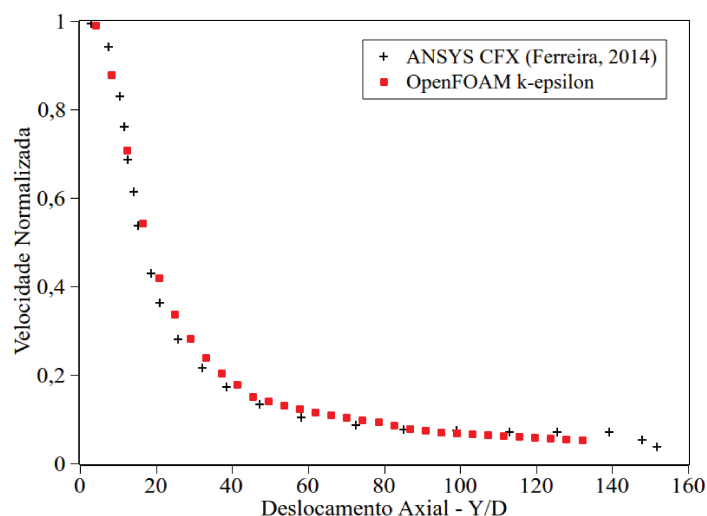


Figura 5.11: Decaimento da velocidade na linha central do jato de ar em razão a distância normalizada com o diâmetro do furo para condição de saída subsônica (Y = distância axial, D = diâmetro do furo): comparação com a ferramenta comercial ANSYS-CFX.

A simulação da condição sônica aplicada ao jato de ar também foi executada. Utilizando a mesma geometria citada anteriormente, foram calculados os dados para condição sônica conforme descrito na Seção 2.2.2. Estes dados encontram-se compilados na Tabela 5.3.

Esta condição de jato foi realizada experimentalmente por Birch *et al.* (1987), entretanto foram medidos poucos pontos. Chuech *et al.* (1989), por sua vez, repetiram os experimentos de Birch *et al.* (1987) com um aparato experimental mais robusto e com isso conseguiram mensurar mais pontos. Estes dados estão graficamente apresentados na Figura 5.12, onde: (a) apresenta os pontos mensurados por Birch *et al.* (1987) e (b) os pontos mensurados por Chuech *et al.* (1989), juntamente destes encontram-se os resultados obtidos pelo OpenFOAM.

A análise da Figura 5.12 mostra que o código do OpenFOAM foi capaz de prever a sobrelevação da velocidade do jato, na região conhecida como *Mach Disk*, na qual a velocidade do jato ultrapassa a velocidade de Mach 1, a ocorrência disso se deve ao processo de expansão do gás da pressão de saída até pressão ambiente. Com relação ao perfil de decaimento do jato, este possui boa concordância com os dados de Chuech *et al.* (1989) e Birch *et al.* (1987).

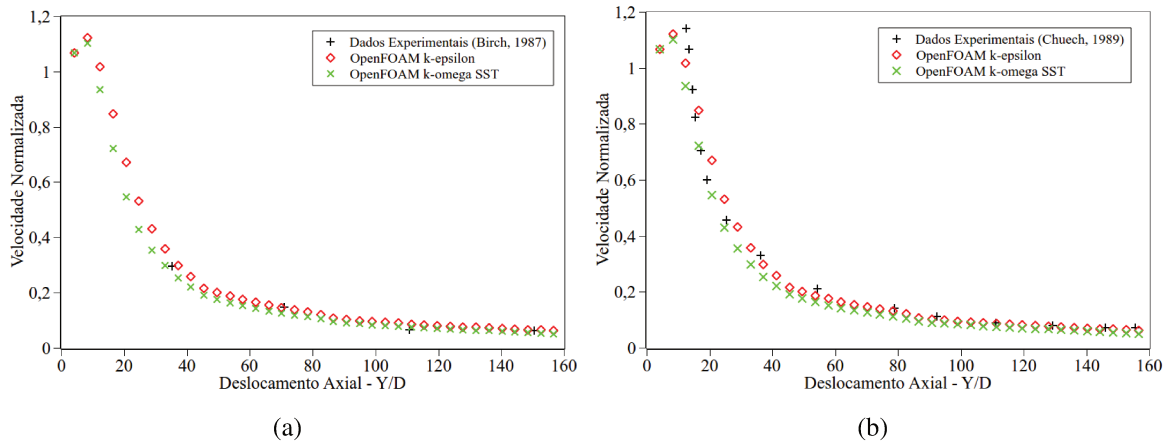


Figura 5.12: Decaimento da velocidade na linha central do jato de ar em razão a distância normalizada com o diâmetro do furo para condição de saída sônica (Y= distância axial, D= diâmetro do furo): (a) comparação com Birch *et al.* (1987) e (b) comparação com Chuech *et al.* (1989).

A comparação com dados experimentais do decaimento da concentração para jatos de metano também foi realizada. Utilizando uma malha com 20496 células, foi executada a simulação de jatos subsônico e sônico de metano. As condições de contorno aplicadas na região do vazamento de gás estão demonstrada nas Tabelas 5.5 e 5.6. As Figuras 5.13 e 5.14 apresentam os resultados, é observada boa concordância com os dados experimentais para ambas as condições simuladas.

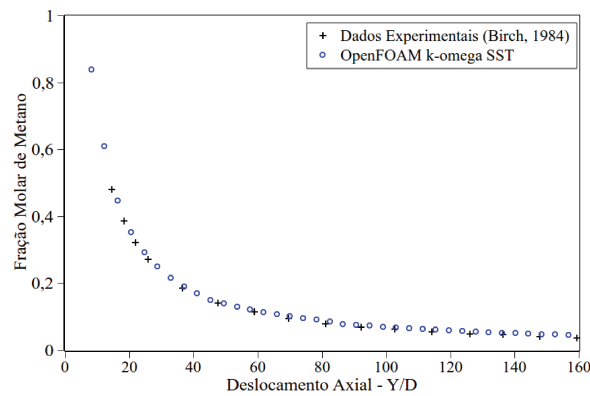


Figura 5.13: Decaimento da concentração de metano na linha central do jato de ar em razão a distância normalizada com o diâmetro do furo para condição de saída subsônica (Y= distância axial, D= diâmetro do furo): comparação com Birch *et al.* (1984).

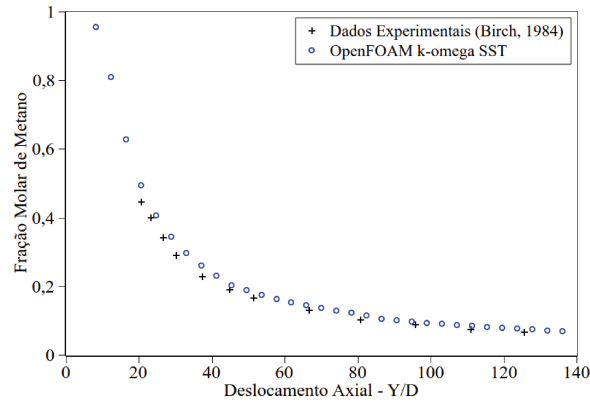


Figura 5.14: Decaimento da concentração de metano na linha central do jato de ar em razão a distância normalizada com o diâmetro do furo para condição de saída sônica (Y = distância axial, D = diâmetro do furo): comparação com Birch *et al.* (1984).

A Figura 5.15 compara qualitativamente o vazamento de gás. A análise da Figura 5.15 mostra que o formato do jato simulado é bastante semelhante ao experimental.

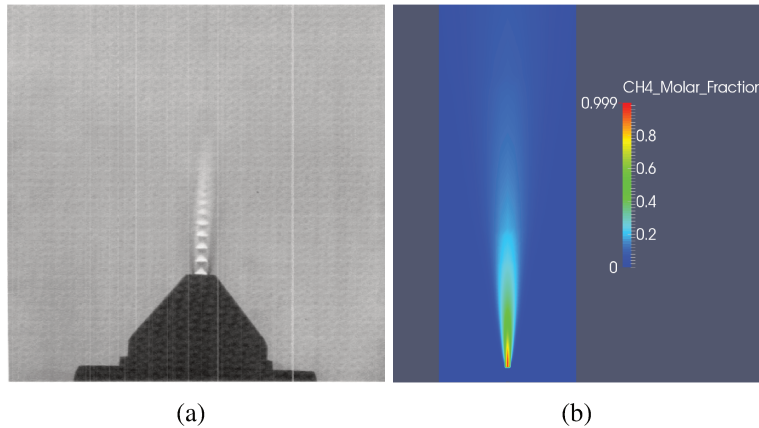


Figura 5.15: Jato subsônico de metano: Experimental - (a) (Birch *et al.* (1984)), (b) OpenFOAM.

5.4 Análise do Número de *Courant* e dos Resíduos

A outra variável levantada foi o erro associado ao passo numérico da simulação. Assim, selecionou-se a malha com 20496 células (Grid_02) e executou-se a simulação de jatos de ar e metano para ambas as condições de emissão, conforme descrito na Seção 5.2. Foram simulados três números de CFL. Para a condição de jato de ar foram estudados os CFLs: 0,8, 5,0 e 10,0.

Como pode ser verificado nas Figuras 5.16, 5.17 (b) apenas com CFL de 0,8 um resíduo menor que 10^{-4} é alcançado, sendo que este resultado ainda é maior que o erro estipulado para a velocidade, que foi de 10^{-6} . Entretanto esse erro relacionado aos números

de CFL maiores não impactou nos resultados da simulação, conforme pode ser observado nas Figuras 5.16, 5.17 (a).

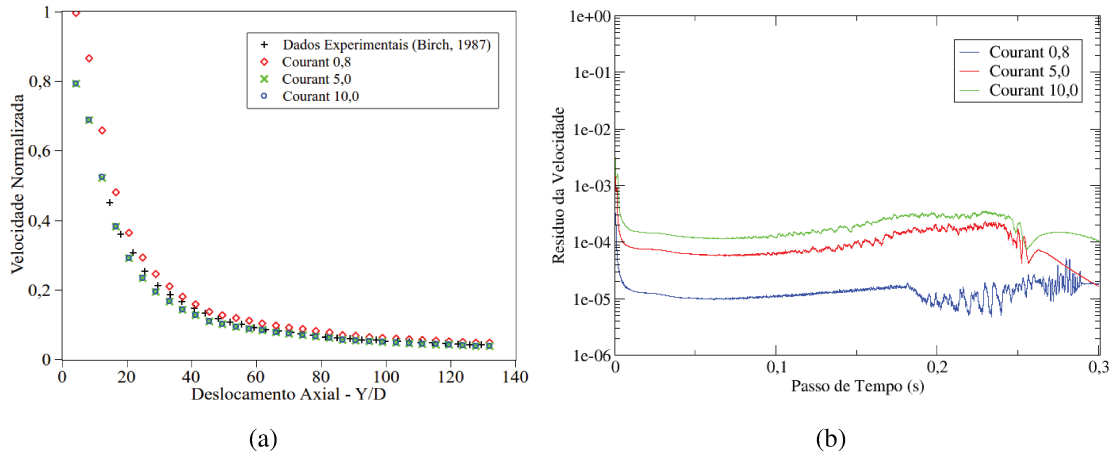


Figura 5.16: (a) Análise da influência do passo numérico no decaimento da velocidade de jato de ar subsônico, (b) Resíduo da velocidade axial por passo de tempo simulado.

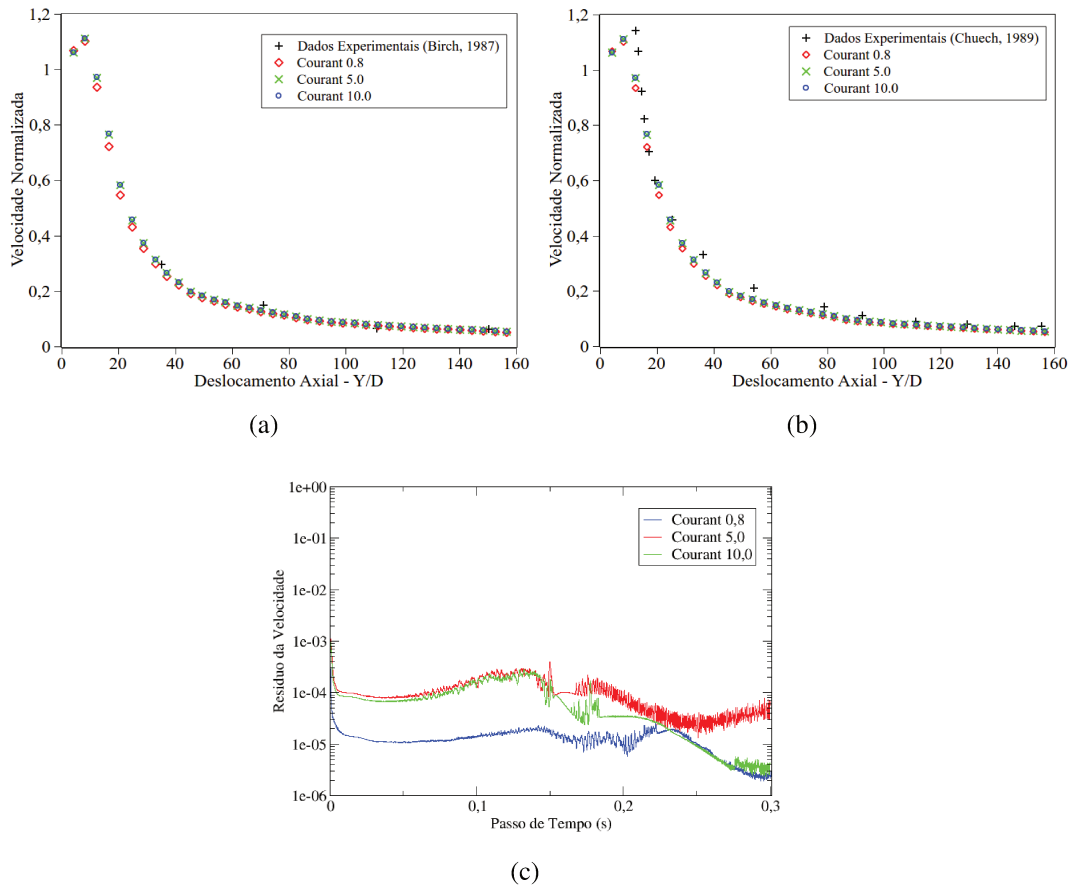


Figura 5.17: Análise da influência do passo numérico no decaimento da velocidade de jato de ar sônico: (a) Comparação com Birch *et al.* (1987), (b) Comparação com Chuech *et al.* (1989) e (c) Resíduo da velocidade axial por passo de tempo simulado.

Na Tabela 5.7 estão apresentados os tempos computacionais de simulação de jatos utilizando um processador. O que pode ser verificado na Tabela 5.7 é que o tempo de simulação reduz significativamente com o aumento do número de *Courant*.

Tabela 5.7: Tempo de simulação computacional de jatos de ar com diferentes números de *Courant*

Condição de Emissão	Malha	<i>Courant</i>	Tempo de Simulação (h)
Subsônica	Grid_02	0,8	5,04
		5,0	0,57
		10,0	0,38
Sônica	Grid_02	0,8	11,82
		5,0	0,71
		10,0	0,52

Na simulação de jato de metano foram estudados os CFLs: 0,8, 5,0 e 10,0, para a condição subsônica de escoamento e os CFLs: 0,8, 5,0 e 6,0 para a condição sônica. Na Figura 5.18 (a) pode ser verificado o perfil de decaimento da fração molar e em (b) o resíduo associado a esta variável. Analisando a Figura 5.18 (b) pode ser observado que apenas com CFL de 0,8 um resíduo menor que 10^{-4} é alcançado, sendo que este resultado ainda é maior que o erro estipulado que foi de 10^{-6} . Entretanto esse erro relacionado aos números de CFL maiores não impactou nos resultados da simulação, conforme pode ser observado na Figura 5.18 (a). Comportamento similar foi observado na análise da condição sônica, sendo os resultados apresentados graficamente na Figura 5.19 (a) e (b).

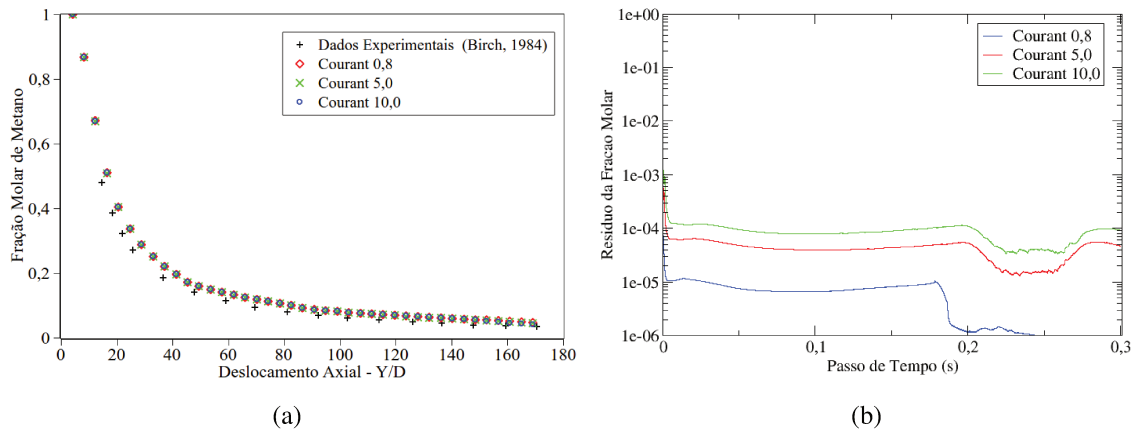


Figura 5.18: (a)Análise da influência do passo numérico no decaimento da fração molar do jato de metano subsônico, (b) Resíduo da concentração axial por passo de tempo simulado.

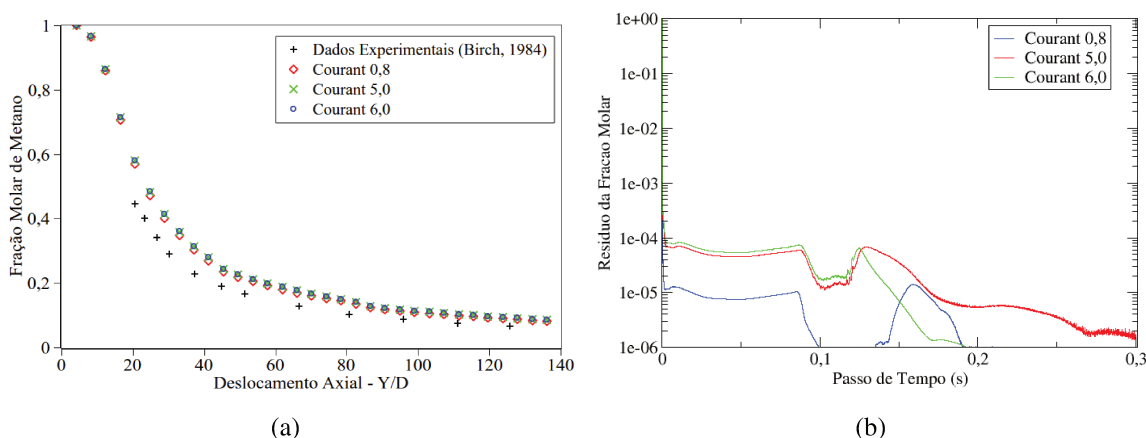


Figura 5.19: (a) Análise da influência do passo numérico no decaimento da fração molar do jato de metano sônico , (b) Resíduo da concentração axial por passo de tempo simulado.

Na Tabela 5.8 estão apresentados os tempos computacionais de simulação de jatos de metano utilizando um processador. O que pode ser verificado na Tabela 5.8 é que o tempo de simulação reduz significativamente com o aumento do número de *Courant*.

Tabela 5.8: Tempo de simulação computacional de jatos de metano com diferentes números de Courant

Condição de Emissão	Malha	<i>Courant</i>	Tempo de Simulação (h)
Sônica	Grid_02	0,8	8,02
		5,0	2,12
		6,0	1,87
Subsônica	Grid_02	0,8	5,30
		5,0	1,33
		10,0	0,76

5.5 Nuvem de Gás Inflamável

Para validar a metodologia de cálculo da nuvem de gás inflamável foi reproduzida uma simulação executada por Gant e Ivings (2005) no *software* ANSYS-CFX. A geometria simulada por esse autor foi de um cilindro com diâmetro de 1 m e altura de 2 m, com furo de diâmetro 10,5 mm, a pressão dentro do reservatório de 5 bar, a velocidade na saída do furo era 375 m/s e temperatura 250 K.

As condições usadas no OpenFOAM foram: geometria de 1x1x10 m com um furo quadrado de 9,4 mm, com pressão, velocidade e temperatura na saída do jato de 2,8 bar, 375

m/s e 250 K, respectivamente. Estas condições foram calculadas pela Equações 2.9, 2.10 e 2.12. O volume foi obtido no ParaView.

O volume de nuvem encontrado por este autor foi de $0,0275 \text{ m}^3$. No OpenFOAM a simulação foi executada até ser alcançada estabilidade do volume da nuvem, o que ocorreu no tempo de 2 segundos. O volume da nuvem calculado foi de $0,0245 \text{ m}^3$, o qual é 11% menor que o encontrado por Gant e Ivings (2005). Mesmo assim pode ser considerado adequado tendo em vista, a diferença entre as malhas e furos utilizados para cada caso. A Figura 5.20 (a) apresenta o iso-contorno da nuvem formada. Um corte central na pluma da nuvem, Figura 5.20 (b), mostra as concentrações para os limites de flamabilidade.

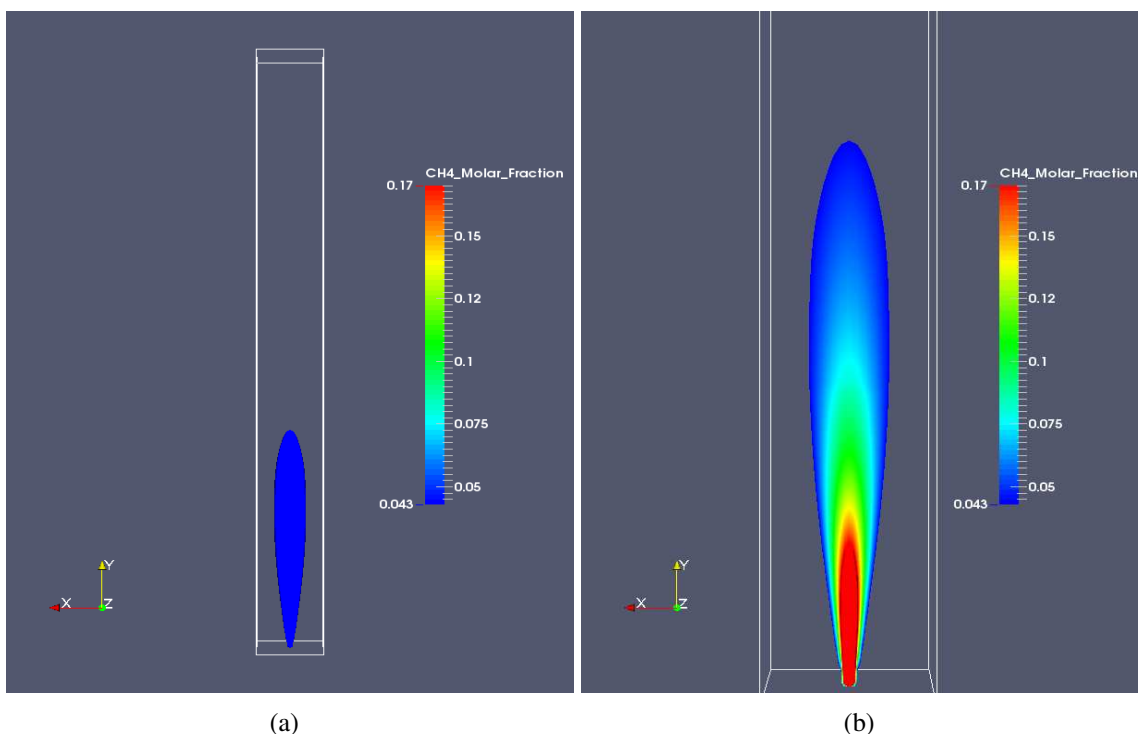


Figura 5.20: Simulação de nuvem de gás inflamável no OpenFOAM - Dominínio computacional com as seguintes dimensões: base com 1x1 m e 10 m de altura - orifício de 9,4 mm de lado- (a) nuvem, (b) corte da nuvem.

Capítulo 6

Estudo de Caso de Engenharia: Simulação de Dispersão em Plataforma *Offshore*

Após a etapa de validação, foi desenvolvido um estudo de caso de engenharia, que consistiu na simulação de um vazamento de gás em ambiente industrial nas condições reais de operação. Neste caso, optou-se em simular o vazamento de metano em uma plataforma *offshore* de exploração de petróleo. A geometria foi criada por Ferreira (2014) por meio do *software* comercial ANSYS-ICEM.

Para execução das simulações, utilizou-se um computador Lenovo com UBUNTU 13.10 – Intel® Core™ i7 vPro™ com 8 GB de memória RAM, utilizando apenas um processador por caso simulado. A malha foi obtida por meio dos utilitários do OpenFOAM como descrito na Seção 4 e exposto no Apêndice A.1. Foi gerado um domínio computacional sendo duas vezes o tamanho da plataforma nas coordenadas (x, y) e uma vez na coordenada (z), como demonstrado na Figura 6.1.

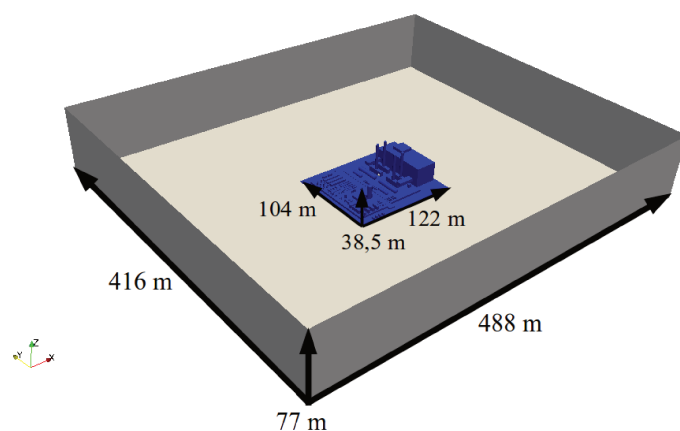


Figura 6.1: Dimensões da plataforma e do domínio computacional utilizados na simulação.

O perfil de ventilação foi analisado em quatro direções: -x (leste), +x (oeste), -y (norte) e +y (sul), foi executado o vazamento no centro da plataforma na direção -z, como pode ser verificado na Figura 6.2. Esta configuração foi escolhida, pois gerará as maiores nuvens, tendo em vista que, o vazamento está direcionado para a região mais congestionada (Ivings *et al.* (2010)). E segundo Qiao e Zhang (2010); Tauseef *et al.* (2011) a situação mais crítica deve ser levantada em se tratando de estudo de vazamento de gás com risco de explosão.

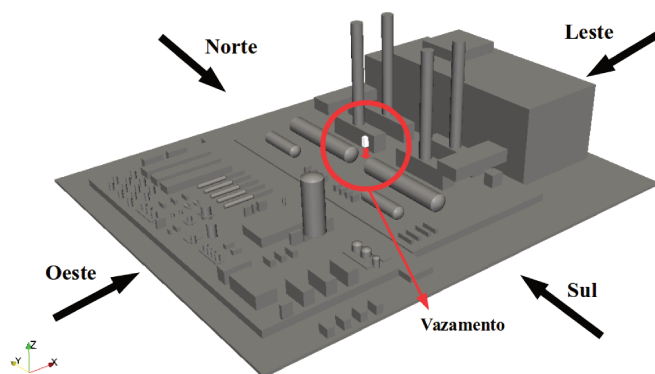


Figura 6.2: Direções de vento e localização da fonte de vazamento na plataforma.

6.1 Sensibilidade de Malha

Foi realizada a análise de sensibilidade de malha para todas as configurações descritas anteriormente. Além da simulação em OpenFOAM também foi executada simulação na ferramenta comercial ANSYS-CFX. O número de elementos contidos em cada malha está demonstrado na Tabela 6.1. As malhas geradas em ambas as ferramentas utilizadas estão demonstradas na Figura 6.3, assim sendo: (a) malha gerada no OpenFOAM com

1.301.663 células e (b) malha gerada no ANSYS-ICEM com 3.624.035 células. A malha do OpenFOAM é estruturada e hexaédrica a do ANSYS-ICEM é não estruturada e tetraédrica. Na Figura 6.3 é possível verificar a vista em corte (y) das malhas, pode ser observado a diferença no grau de refinamento e no número de elementos de cada malha.

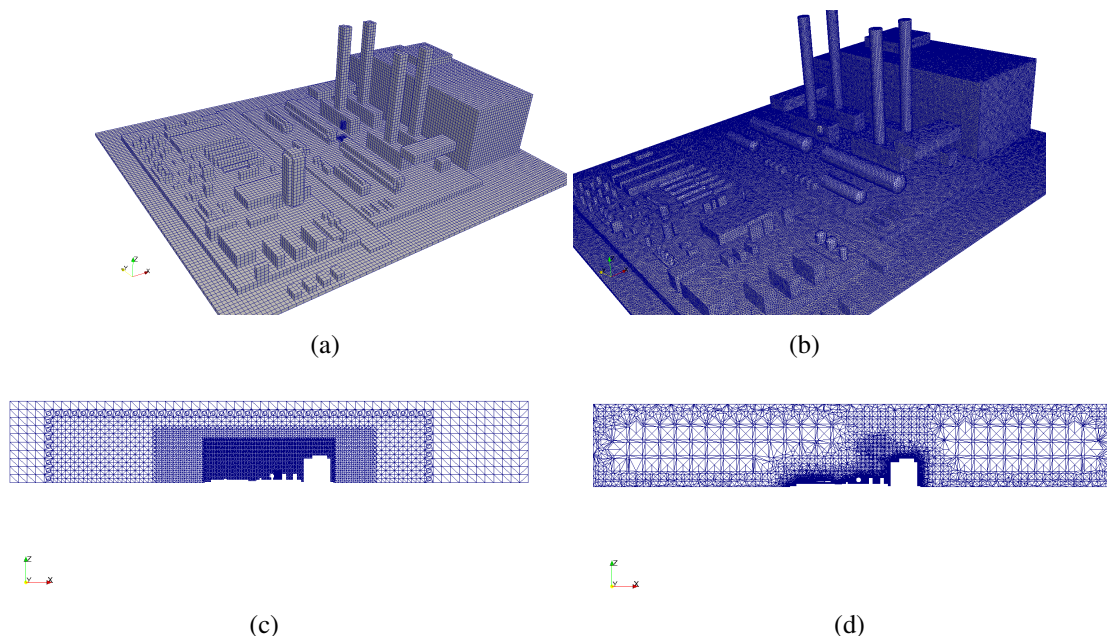


Figura 6.3: Malha utilizada nas simulações da plataforma *offshore* - (a) Estrutura 3D da plataforma - Malha OpenFOAM, (b) Estrutura 3D da plataforma - Malha ANSYS-ICEM, (c) Vista em corte - Malha OpenFOAM e (d) Vista em corte - Malha ANSYS-ICEM.

Tabela 6.1: Identificação das malhas utilizadas na simulação em plataforma *offshore*

Ferramenta	Malha	No. de Células
OpenFOAM	Mesh_01	375.834
	Mesh_02	1.301.663
	Mesh_03	1.843.444
ANSYS-CFX	Mesh_01	1.038.199
	Mesh_02	3.624.035
	Mesh_03	7.656.966

Após a geração de malha foram determinadas as condições de contorno a serem aplicadas em cada ferramenta, estas estão demonstradas na Tabela 6.2. Em ambos os *softwares* foi simulada uma taxa de descarga de metano de 100 kg/s, sendo que no OpenFOAM esta condição foi criada por meio da consideração da velocidade de descarga 100 m/s em combinação com a dimensão do orifício, que foi um quadrado com 1,18 m de lado. Assumiu-se esta velocidade, pois o efeito da compressibilidade é desprezível a

Mach 0,3, assim tempo computacional seria poupado na simulação, tendo em vista que o *rhoReactingBuoyantFoam* é um *solver* compressível. A pressão é atmosférica (1 atm) e a temperatura é de 297 K. A ventilação considerada foi de 6 m/s. Ambas as condições citadas são iniciadas simultaneamente.

Tabela 6.2: Condição de Contorno Aplicada na Simulação de Dispersão de Gás no OpenFOAM e no ANSYS-CFX

Região	Condições de Contorno Utilizada em Cada Ferramenta	
	OpenFOAM	ANSYS-CFX
Superfícies sólidas	Função de parede (parede lisa e fixa)	Parede lisa e fixa
Vazamento	Prescrição de velocidade	Prescrição da taxa de descarga mássica
Ventilação	Prescrição de velocidade	Prescrição de velocidade
Domínio Computacional	Pressão total $p_0=101325$ Pa	Pressão relativa = 0

Os parâmetros de simulação adotados para cada *software* estão apresentados na Tabela 6.3. A metodologia aplicada para cada ferramenta está explicada em detalhes nos Apêndices A e B.

Tabela 6.3: Parâmetros da Simulação de Dispersão de Gás no OpenFOAM e no ANSYS-CFX

Parâmetro	Valor ou Tipo Utilizado em Cada Ferramenta	
	OpenFOAM	ANSYS-CFX
Pressão de Referência	1 atm	1 atm
Regime do Escoamento	Transiente e compressível	Estacionário e incompressível (subsônico)
Modelo de Turbulência	κ -omega SST	κ -omega SST
Esquema de Interpolação	<i>Upwind</i>	<i>Upwind</i>
Passo numérico	Ajustável pelo <i>Courant</i> máximo (1.0)	<i>Auto timescale</i> (1.0)
Critério de Convergência	Resíduo	RMS
Resíduo Máximo	$1 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$
Tempo final/Número mínimo e máximo de iterações	Até volume da nuvem entrar em regime	1-1000

Na Figura 6.4 é apresentada a análise de sensibilidade de malha para o *software* ANSYS-CFX, sendo que a direção de ventilação analisada foi a leste. Pode ser observado que não há diferença significativa entre os resultados para as malhas Mesh_02 e Mesh_03. Assim evidenciando a independência dos resultados quanto a malha.

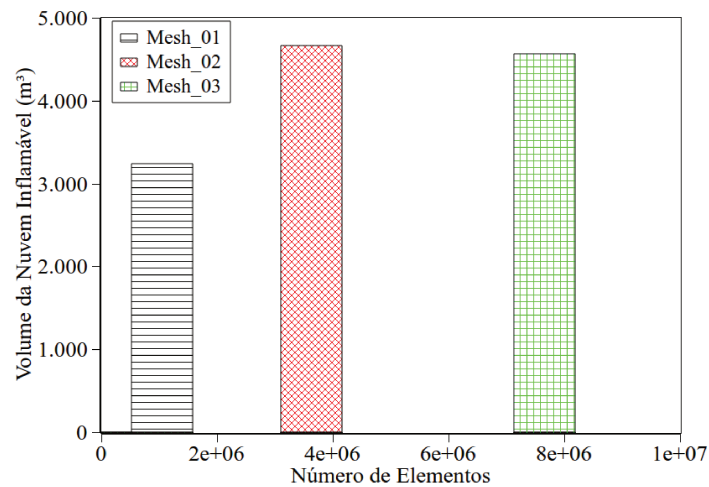


Figura 6.4: Análise de sensibilidade de malha para a simulação da plataforma *offshore* executada na ferramenta ANSYS-CFX - Nuvem inflamável gerada pela ventilação da direção leste.

Na Figura 6.5 é apresentada a análise de sensibilidade de malha para o *software* OpenFOAM. Pode ser observado que não há diferença significativa entre os resultados para as malhas Mesh_02 e Mesh_03. Assim evidenciando a independência dos resultados quanto a malha. A verificação do volume final da nuvem, foi realizada por meio do monitoramento do volume até este atingir o regime estacionário. O que pode ser verificado pelos gráficos apresentados na Figura 6.5. Diferentemente da abordagem adotada para a ferramenta ANSYS-CFX, no OpenFOAM foram simuladas todas as direções de ventilação, uma vez que, a metodologia proposta neste trabalho está sendo investigada.

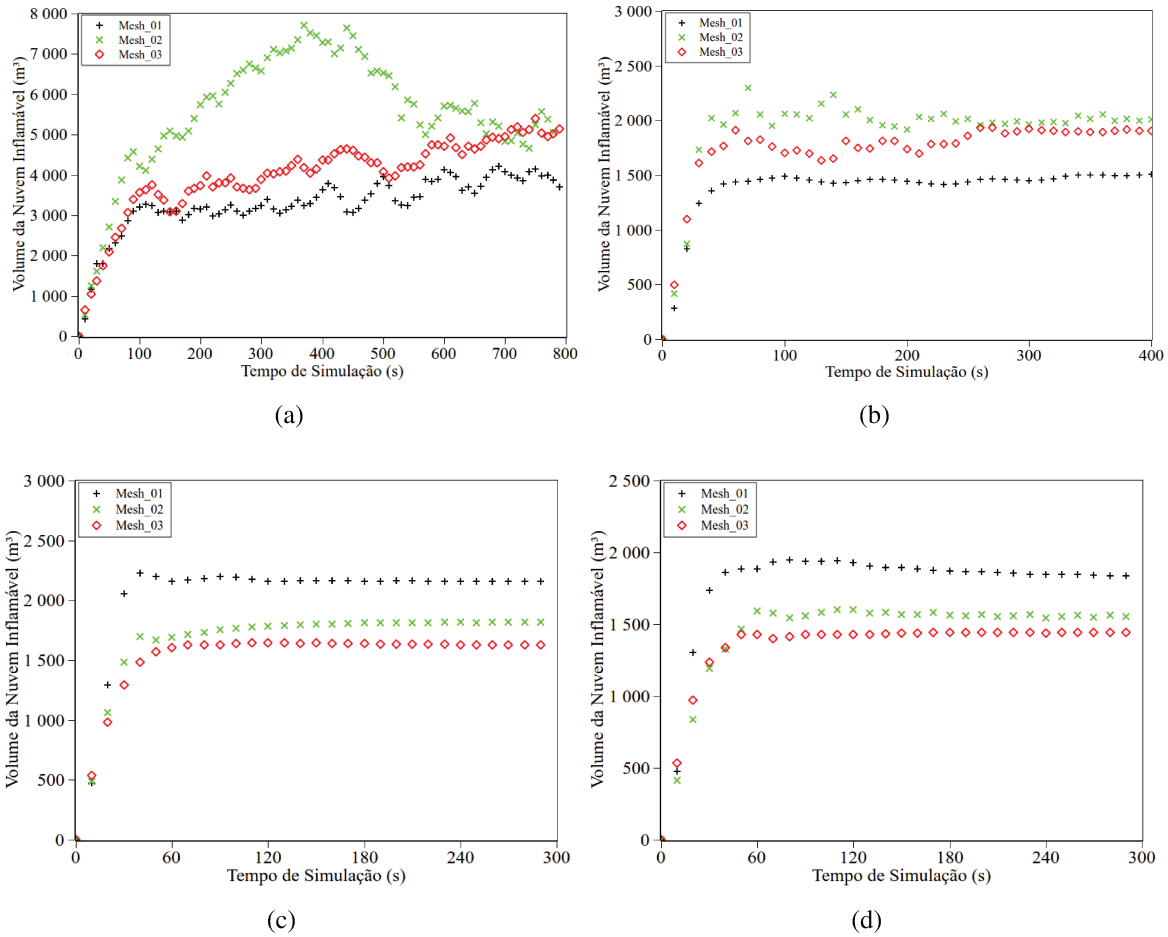


Figura 6.5: Análise de sensibilidade de malha para a simulação da plataforma *offshore* executada na ferramenta OpenFOAM - Evolução do volume da nuvem inflamável ao longo do tempo: (a) Leste, (b) Oeste, (c) Norte e (d) Sul.

6.2 OpenFOAM *versus* ANSYS-CFX

A próxima etapa consistiu na comparação dos resultados obtidos pelo OpenFOAM com a ferramenta comercial ANSYS-CFX. A malha utilizada nesta comparação em ambos os casos foi o Mesh_03, conforme Tabela 6.1, a malha utilizada em cada ferramenta pode ser verificada na Figura 6.3. Na Tabela 6.4, está apresentado o volume final atingido pelo vazamento de metano e dispersão pelo vento. Conforme esperado o cenário com a configuração mais congestionada gerou a maior nuvem, que neste caso é aquele em que a ventilação é oriunda da direção leste. As outras direções alcançaram volumes similares, o que se justifica pela simetria da estrutura em estudo.

Na Tabela 6.4 também é demonstrada a diferença entre a ferramenta livre em comparação com a comercial. Como pode ser observado a diferença entre os valores de

nuvem da ferramenta livre em comparação com a comercial está em torno de 2% a 8%. Sendo que em no caso de maior nuvem (leste) o OpenFOAM foi mais conservador que o ANSYS-CFX, assim sendo, o risco não é subestimado para o pior cenário. Além disso, esta diferença pode ser ocasionada pelo efeito das malhas simuladas, tendo em vista que são malhas distintas, conforme demonstrado na Seção 6.1.

Tabela 6.4: Volume da nuvem de gás inflamável - OpenFOAM *versus* ANSYS-CFX

Direção do vento	Volume da nuvem inflamável (m ³)		Diferença (%)
	OpenFOAM	ANSYS CFX	
Leste	5011,1	4662,5	7,47
Oeste	1901,0	1959,8	3,00
Norte	1624,3	1714,2	5,24
Sul	1441,2	1409,0	2,27

Nas Figuras 6.6, 6.7, 6.8 e 6.9, estão demonstradas as nuvens formadas, sendo que: (a) apresenta o corte em $z = 2,5\text{m}$ do iso-contorno da nuvem formada na faixa inflamável de 0,05 a 0,15 molar para o metano em vista superior - ferramenta OpenFOAM e (b) apresenta o corte em $z = 2,5\text{m}$ do iso-contorno da nuvem formada na faixa inflamável de 0,05 a 0,15 molar para o metano em vista superior - ferramenta ANSYS-CFX, (c) apresenta o corte em $y = 52\text{m}$ do iso-contorno da nuvem formada na faixa inflamável de 0,05 a 0,15 molar para o metano em vista lateral - ferramenta OpenFOAM e (d) apresenta o corte em $y = 52\text{m}$ do iso-contorno da nuvem formada na faixa inflamável de 0,05 a 0,15 molar para o metano em vista lateral - ferramenta ANSYS-CFX. Como pode ser verificado qualitativamente a ferramenta livre obteve resultados similares aos da ferramenta comercial.

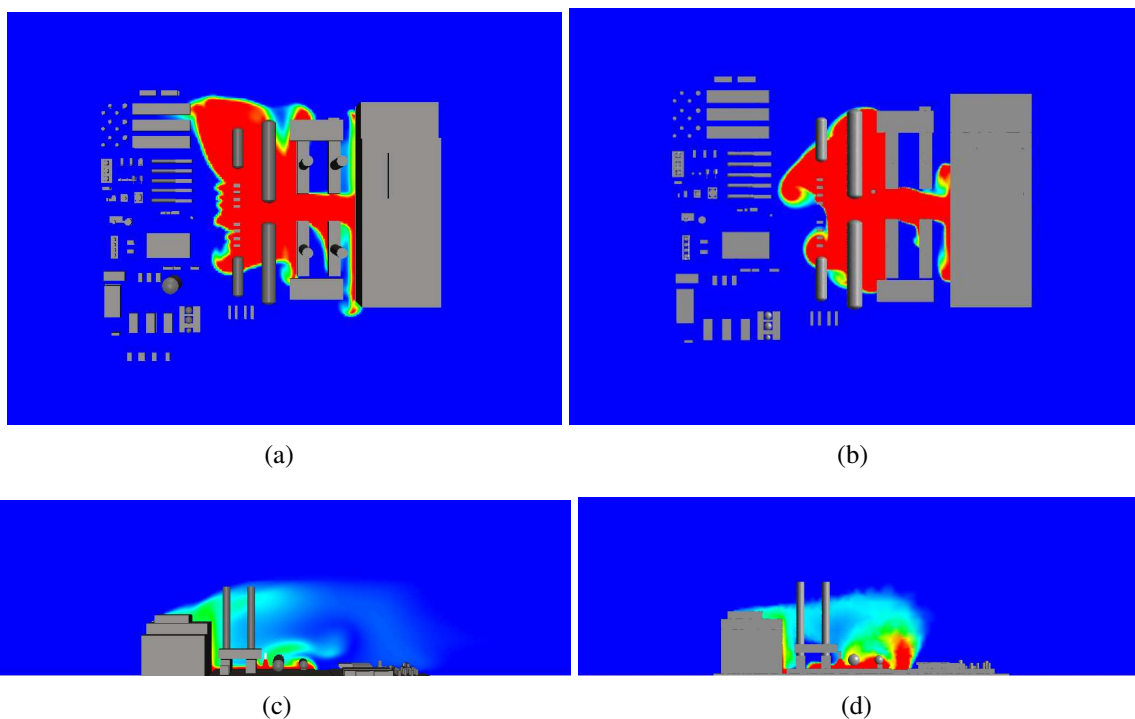


Figura 6.6: Nuvem de gás inflamável com ventilação na direção Leste - Iso-contorno da nuvem: (a) vista superior em corte - OpenFOAM, (b) vista superior em corte - ANSYS-CFX, (c) vista lateral em corte - OpenFOAM, (d) vista lateral em corte - ANSYS-CFX.

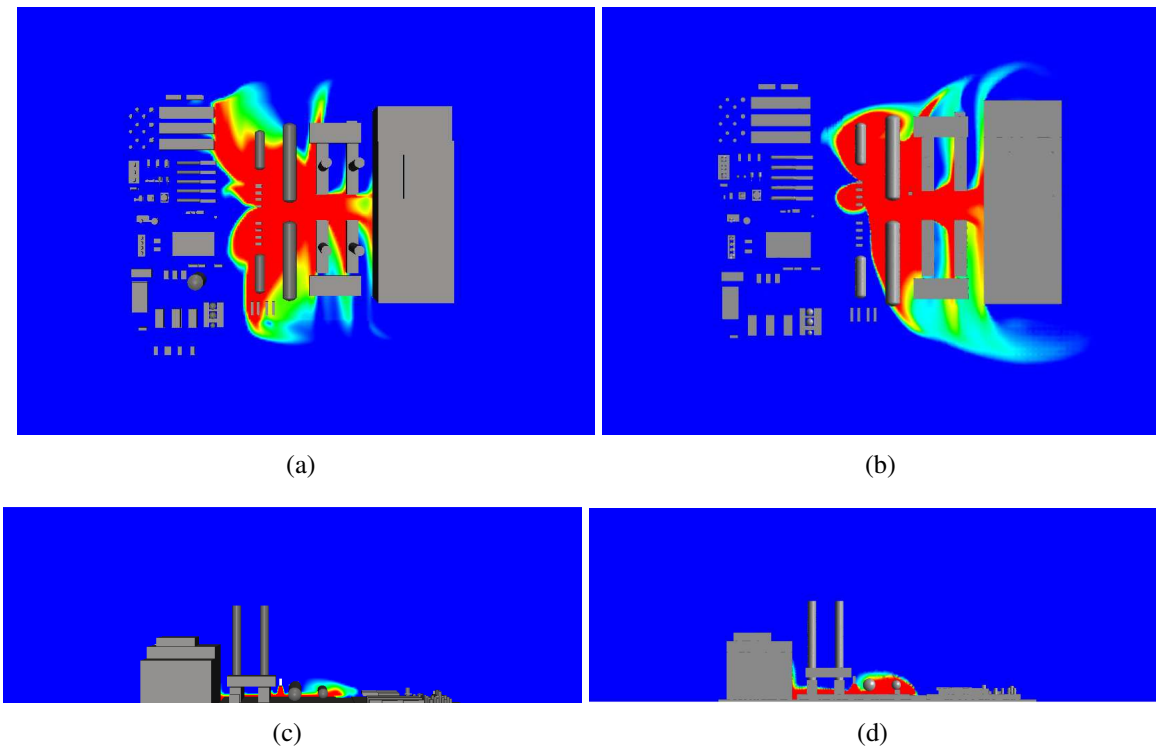


Figura 6.7: Nuvem de gás inflamável com ventilação na direção Oeste - Iso-contorno da nuvem: (a) vista superior em corte - OpenFOAM, (b) vista superior em corte - ANSYS-CFX, (c) vista lateral em corte - OpenFOAM, (d) vista lateral em corte - ANSYS-CFX.

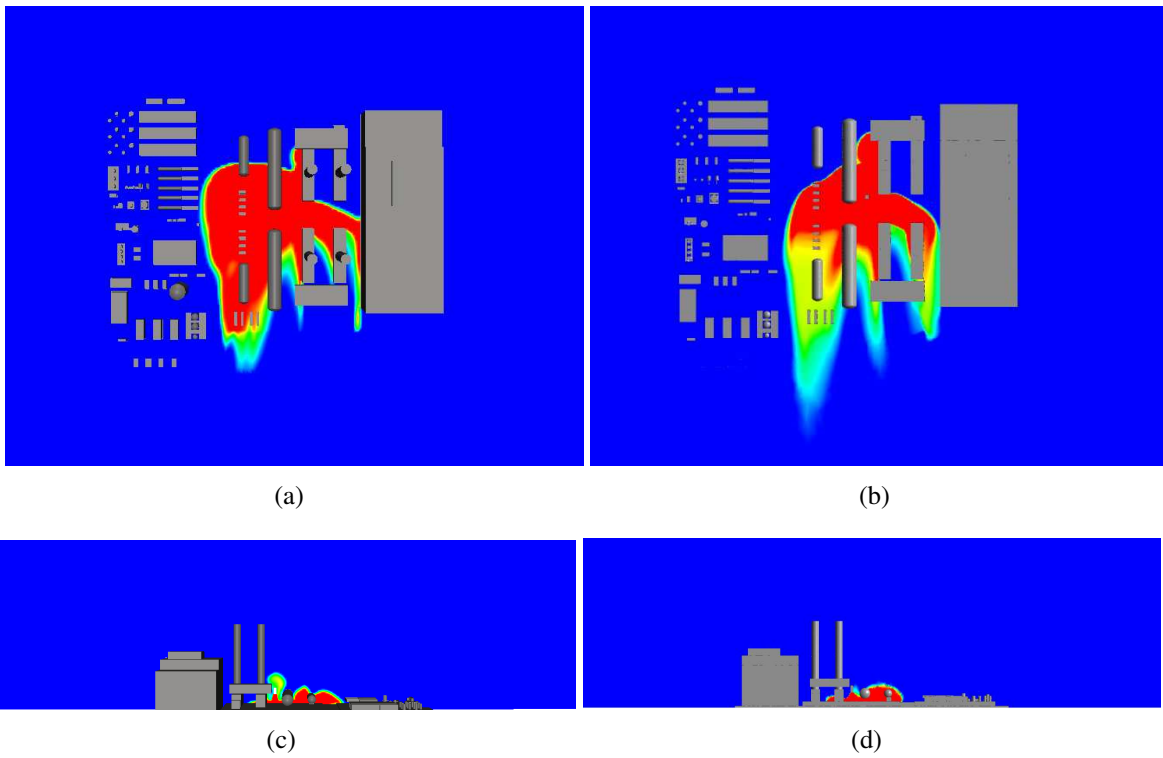


Figura 6.8: Nuvem de gás inflamável com ventilação na direção Norte - Iso-contorno da nuvem: (a) vista superior em corte - OpenFOAM, (b) vista superior em corte - ANSYS-CFX, (c) vista lateral em corte - OpenFOAM, (d) vista lateral em corte - ANSYS-CFX.

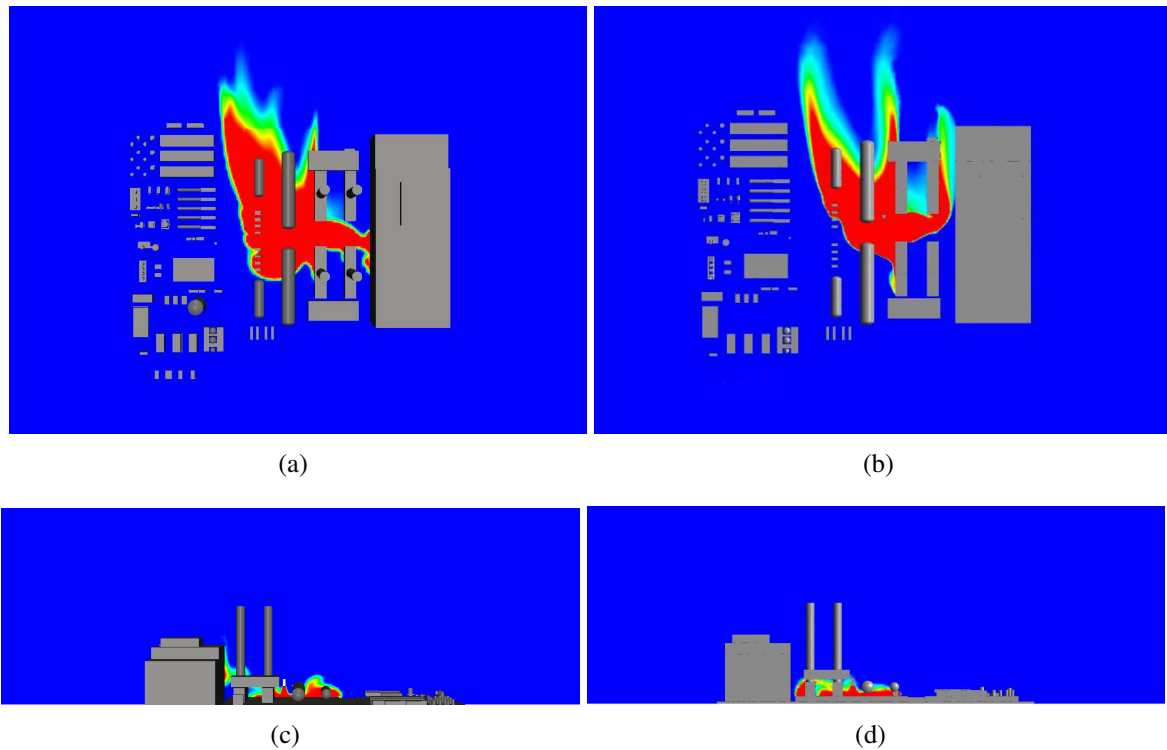


Figura 6.9: Nuvem de gás inflamável com ventilação na direção Sul - Iso-contorno da nuvem: (a) vista superior em corte - OpenFOAM, (b) vista superior em corte - ANSYS-CFX, (c) vista lateral em corte - OpenFOAM, (d) vista lateral em corte - ANSYS-CFX.

Capítulo 7

Conclusões e Propostas para Trabalhos Futuros

7.1 Conclusões

Este trabalho desenvolveu uma metodologia confiável para a utilização da ferramenta livre OpenFOAM na simulação de dispersão de gás. Para o desenvolvimento desta metodologia, o primeiro passo foi a escolha de um *solver* adequado, bem como, a análise crítica dos resultados obtidos, nesta etapa investigativa foram testados os *solvers*: *reactingFoam* e *rhoReactingBuoyantFoam*. Chegou-se a conclusão que o *solver* *rhoReactingBuoyantFoam* é o mais adequado para esta finalidade, pois leva em consideração o efeito do empuxo que é crucial na dispersão de gases.

Depois da escolha do *solver* foi iniciada a etapa de validação. A qual consistiu na simulação de jatos, tendo como base dados experimentais extraídos da literatura, e também a comparação destes resultados com os obtidos por meio da ferramenta comercial ANSYS-CFX. Os resultados obtidos pelo OpenFOAM foram similares aos experimentais e aos do *software* comercial. Assim validando a customização executada neste *solver* avaliando a região de dispersão próximo a saída do jato.

A análise do modelo de turbulência mais adequado também foi considerada, tendo em vista a importância da escolha do modelo que melhor prediz este fenômeno. Em conjunto com a abordagem da turbulência, foi avaliada a sensibilidade da malha computacional. Como esperado as malhas mais refinadas obtiveram resultados mais acurados. Com relação aos modelos de turbulência, a abordagem κ -epsilon se mostrou menos eficiente, quando utiliza-se malhas não uniformes, em comparação com a abordagem κ -omega SST, para o

caso em estudo. A conclusão a qual se chegou, foi que a modelagem κ -omega SST é mais adequada para dispersão quando utiliza-se malhas não uniformes. Corroborando com o que é encontrado na literatura. Assim, para o modelo κ -epsilon, não pode ser validada a convergência desta malha não-uniforme. Mais pesquisas devem ser desenvolvidas para avaliar diferentes configurações de malhas e aprofundar este estudo.

Como forma a aumentar o passo numérico e acelerar a solução sem contudo, perder a precisão. A análise da influência do número de *Courant* foi estudada. O que pôde ser notado é que o aumento do número de *Courant* acelera consideravelmente a solução e que o erro numérico não é tão pronunciado. Entretanto, a escolha do número de CFL adequado deve ser realizada com cautela, no caso de simulação de dispersão de gás em geometrias de maior porte, pois este número também é dependente do tamanho da célula computacional.

Após a etapa de validação, iniciou-se a simulação e avaliação da metodologia para o cálculo do volume da nuvem de gás inflamável. Com base em dados da literatura, obtidos via *software* comercial, foi realizada uma análise preliminar desta metodologia. Houve boa concordância entre os resultados obtidos pelo OpenFOAM e os dados da literatura.

Existia contudo a necessidade de avaliar situações reais de engenharia. Nesse sentido, simulou-se uma plataforma *offshore* em condições reais de operação, levando em consideração a situação mais crítica, que se caracteriza pelo vazamento na direção -z em um caso de vazamento de metano. Foi executada a análise de sensibilidade de malha, para garantir a independência do resultado com relação a malha. A maior nuvem gerada foi aquela, na qual o perfil de ventilação era oposto ao módulo de acomodação (leste). O que se justifica, pois é o cenário onde a ventilação encontra mais zonas congestionadas.

Estas simulações também foram desenvolvidas por meio do *software* comercial ANSYS-CFX, os resultados obtidos foram bastante próximos aos resultados obtidos pelo OpenFOAM. A diferença entre os volumes de nuvens na comparação do código aberto com o comercial foi de 2 a 8%. O que sugere que a ferramenta OpenFOAM, em específico o *solver reactingFoam*, aparece como uma alternativa gratuita a *softwares* comerciais para simulações de dispersão de gás.

7.2 Propostas para Trabalhos Futuros

Considerando a quantidade de variáveis que podem ser exploradas na análise da dispersão de gás e no curto período de tempo disponível para o desenvolvimento da mesma, propõem-se as seguintes sugestões para os trabalhos futuros, no sentido de aprimorar e

desenvolver métodos para resolução de casos de engenharia por meio de CFD utilizando o OpenFOAM:

- i. Simular a mesma malha utilizada no OpenFOAM, na ferramenta comercial ANSYS-CFX, no sentido a verificar a física contida na ferramenta aberta.
- ii. Simular condições de vento composto por duas direções: noroeste, sudeste, nordeste e sudoeste.
- iii. Implementar no código a condição de contorno *Atmospheric Boundary Layer* (ABL), no solver *rhoReactingBuoyantFoam*, para simulação do perfil log-linear do vento.
- iv. Implementar no código a classificação da condição de saída para jatos e o cálculo das condições de contorno no orifício do vazamento, baseadas nas condições de operações estipuladas pelo usuário.
- v. Customização do código para simular em regime estacionário e considerar escoamento incompressível.
- vi. Testar a simulação de outros tipos de gases.

Referências Bibliográficas

- API RP 521. Guide for pressure-relieving and depressuring systems. **American Petroleum Institute**, 2008.
- BAKKUM, E. A.; DUIJM, N. J. Vapour cloud dispersion. **Methods for the calculation of physical effects “Yellow Book”**, 2005.
- BARALDI, D.; WILKENING, H; HEITSCH, M. CFD simulations of light gas release and mixing in the BMC with CFX. **Nuclear Engineering and Design**, p. 618–626, 2008.
- BENINTENDI, R. Turbulent jet modelling for hazardous area classification. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, 23, p. 373-378, 2010.
- BILTOFT, C.A.; YEE, E.; JONES, C.D. **Overview of the Mock Urban Setting Test (MUST)**, 2001. Disponível em :<<https://ams.confex.com/ams/pdfpapers/36654.pdf>>. Acesso em: 05/01/15.
- BIRCH, A.D.; BROWN, D.R.; DODSON, M.G.; SWAFFIELD, F. The structure and concentration decay of high pressure jets of natural gas. **Combustion Science and Technology**, v. 36, p.249-261, 1984.
- BIRCH, A. D.; HUGES , D. J.; SWAFFIELD, F. Velocity decay of high pressure jets. **Combustion Science and Technology**, v. 52, p.161-171, 1987.
- CENTER FOR CHEMICAL PROCESS SAFETY OF THE AMERICAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS. **Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis**, 2nd Edition, Library of Congress Cataloging-in-Publication Data, New York, 2000.
- ÇENGEL, Y. A.; CIMBALA, J. M. **Fluid mechanics : fundamentals and applications**. 1st ed. McGraw-Hill, 2006.
- CHUECH,S. G.; LAI, M.C.; FAETH, G. M. Structure of turbulent Sonic underexpanded free jets. **American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal**, v. 27, N.5, p.549-559, 1989.
- COURANT, R.; FRIEDRICHS, K.; LEWY, H. On the partial difference equations of mathematical physics. **IBM Journal**, p.215-234, 1967.

DIEGUEZ, Consuelo; CARNEIRO, Marcelo. Desastre em alto-mar: Explosão na maior plataforma do mundo, responsável por 6% do petróleo brasileiro, mancha a imagem da Petrobras e do país. **Rev.Veja**. 2001. Disponível em: <http://veja.abril.com.br/210301/p_036.html>. Acesso em: 01/02/15.

DIXON, C. Gas dispersion with OpenFOAM. **Shell Research Ltd.** (relatório), 2012. Disponível em: <<http://ukelg.ps.ic.ac.uk/49CD.pdf>>. Acesso em: 05/10/14.

EIA - U.S. ENERGY INFORMATION ADMINISTRATION. Schematic Geology of Natural Gas Resources. Disponível em: <http://www.eia.gov/oil_gas/natural_gas/special/ngresources/ngresources.html>. Acesso em: 26/06/14.

FERREIRA, T. D. **Developing a mathematical model for prediction of flammable gas cloud size based on CFD and response surface methodology**. 2014. 108 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2014.

FERREIRA, T. D.; VIANNA, S.S.V. A Novel Coupled Response Surface for Flammable Gas Cloud Volume Prediction. **Int. J. Mod. Sim. Petr. Ind.**, Vol 8, No 1. 2014.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computational methods for fluid dynamics**. Springer, 1999.

FLECK, A.B. **Dispersão de Gases Inflamáveis em Plataformas Offshore: Localização de Detectores**. 2008. 219 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2008.

GANT, S. E.; IVINGS, M. J. CFD modelling of low pressure jets for area classification. **Health and Safety Laboratory**.

HANNA, S.R.; CHANG, J.C. Use of the Kit Fox field data to analyze dense gas dispersion modeling issues. **Atmospheric Environment**, p. 2231-2242, 2001.

HANNA, S.R.; HANSEN, O.R.; DHARMAVARAM, S. FLACS CFD air quality model performance evaluation with Kit Fox, MUST, Prairie Grass, and EMU observations. **Atmospheric Environment**, p. 4675-4687, 2004.

IVINGS, M.J.; GANT, S.E.; SAUNDERS, C.J.; POCKOCK, D.J. Flammable gas cloud build up in a ventilated enclosure **Journal of Hazardous Materials**. p. 170-176, 2010.

LEES, F.P. **Loss Prevention in the Process Industries - Hazard Identification, Assessment and Control**. 4rd edition, Butterworth-Heinemann, Oxford, UK, 2012.

- MACALISTER, T. Piper Alpha disaster: how 167 oil rig workers died. **The Guardian**. July - 2013. Disponível em: <<http://www.theguardian.com/business/2013/jul/04/piper-alpha-disaster-167-oil-rig>>. Acesso em: 22/10/14.
- MACK, A.; SPRUIJT, M.P.N. Validation of OpenFoam for heavy gas dispersion applications. **Journal of Hazardous Materials**, v. 262, p. 504-516, 2013.
- MALALASEKERA, W.; VERSTEEG, H.K. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics – The Finite Volume Method**. 2nd edition, Longman, London, UK, 1995.
- MENTER, F.; ESCH, T. Elements of Industrial Heat Transfer Prediction. **16th Brazilian Congress of Mechanical Engineering (COBEM)**, 2001.
- MIH, W.C. Equations for axisymmetric and two-dimensional turbulent jets. **Journal of Hydraulic Engineering**, 115, p.1715-1719, 1989.
- NATURAL GAS ORG. Natural Gas Overview and Background. Disponível em: <<http://naturalgas.org/overview/background/>>. Acesso em: 26/06/14.
- NOBRES, Juirana. G1 viaja até navio-plataforma onde ocorreu explosão, no ES. **Portal G1**. 2015. Disponível em: <<http://g1.globo.com/espirito-santo/noticia/2015/02/g1-viaja-ate-navio-plataforma-onde-ocorreu-explosao-no-es.html>>. Acesso em: 01/02/15.
- OPENFOAM. **User Guide**. versão 2.3.0. OpenCFD Limited, 2014a. Disponível em: <<http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/UserGuide.pdf>>.
- OPENFOAM. **Programmer's Guide**. versão 2.3.0. OpenCFD Limited, 2014b. Disponível em: <<http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/ProgrammersGuide.pdf>>.
- PARAVIEW, 2013. **ParaView User's Guide**. [S.l.], 2014. Disponível em :<<http://www.paraview.org/>>.
- PATANKAR, S.V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Taylor & Francis Group: Hemisphere Publishing Corporation; New York, USA, 1980.
- QIAO, A.; ZHANG, S. Advanced CFD modeling on vapor dispersion and vapor cloud explosion. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, p. 843-848, 2010.
- RICOU, F. P.; SPALDING, D. B. Measurements of entrainment by axisymmetrical turbulent jets. **Journal of Fluid Mechanics**, 11(1), 21e32, 1961.
- RIGAS, F; SKLAVOUNOS, S. Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles. **Journal of Hazardous Materials** A108, p. 9–20, 2004.

- SFORZA, P.M.; STEIGER, M.H.; TRENTACOSTE, N. Studies on here-dimensional viscous jets **AIAA J.**, p. 800-806, 1966.
- TAUSEEF, S.M.; RASHTCHIAN, D; ABBASI, T.; ABBASSI, S.A. A method for simulation of vapour cloud explosions based on computational fluid dynamics (CFD). **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, p. 638-647, 2011.
- WAKES, S.J.; HOLDØ, A.E.; MEARES, A.J. Experimental investigation of the effect orifice shape and fluid pressure has on high aspect ratio cross-sectional jet behaviour. **Journal of Hazardous Materials**, A89, p. 1-27, 2002.

Apêndice A

Procedimento de Engenharia para Simulação de Dispersão de Gás no OpenFOAM

Para realizar um caso de dispersão é necessário escolher o solver adequado, neste caso o *reactingFoam*, e adaptá-lo fazendo a customização para executar a dispersão. A estrutura do caso é disposta em pastas, o caminho a ser seguido para acessar o *solver* que será modificado está demonstrado na Figura A.1.



Figura A.1: Estrutura do caso tutorial do *solver reactingFoam*.

Dentro de cada pasta estão contidos os arquivos que serão modificados, a primeira etapa é a geração de geometria e malha, após serão modificados os arquivos de propriedades, controle da simulação e esquemas numéricos e ao final as condições iniciais e de contorno. Esta sequência de modificações será explicada em maiores detalhes a seguir.

A.1 Geometria e Malha

Para fazer a malha no estudo de caso de engenharia utilizou-se uma geometria em formato STL e gerou-se a malha por meio dos utilitários do OpenFOAM. Para executar a pri-

meira etapa da obtenção da malha utilizou-se a ferramenta HELYX-OS®, que é uma interface gratuita para o OpenFOAM e pode ser obtida em: <http://sourceforge.net/projects/helyx-os/>.

Por meio dessa ferramenta é possível gerar os arquivos *blockMeshDict* e *snappyHexMeshDict*. No terminal deve ser executado o comando `./HELIX-OS.sh`. Assim que o programa abrir deve ser selecionado um novo caso, este deve ser nomeado e ser desmarcada a opção de paralelizar, conforme Figura A.2.

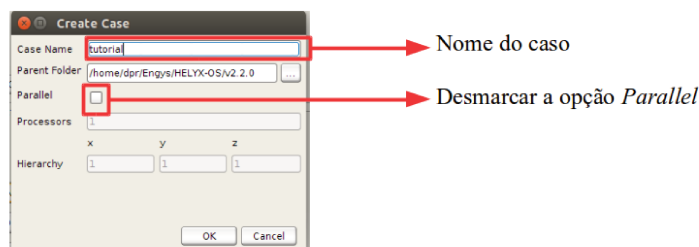


Figura A.2: Criação um caso na ferramenta HELYX-OS®.

Assim que o caso for criado, deve ser copiada a geometria em STL para a pasta *triSurface*. Esta pasta foi criada no *folder* em que do caso HELYX-OS® foi salvo e está dentro da pasta *constant*. O próximo passo é a importação da geometria que será malhada. Na aba *Geometry*, entrar em *STL>tutorial>constant>triSurface*, onde o usuário alocou a geometria e selecioná-la. Conforme instrução na Figura A.3

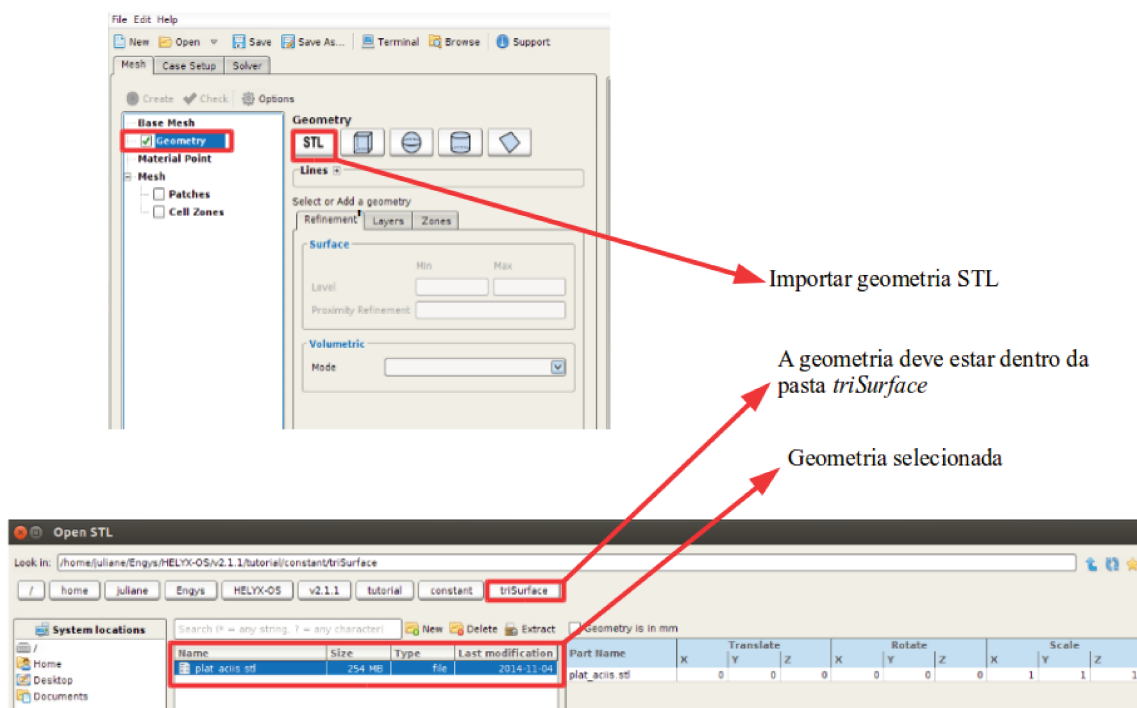


Figura A.3: Importação de geometria STL no HELYX-OS®.

Na Figura A.4 pode ser visualizada a geometria que foi importada. Após a importação da geometria deve ser determinado as dimensões do domínio computacional. Estas dimensões serão utilizadas pelo HELYX-OS® para a geração do *blockMeshDict*. Assim entrar na aba *Base Mesh>Base Mesh Type>User Defined* e colocar as coordenadas em x, y, e z do domínio, assim como o número de elementos, conforme Figura A.4.

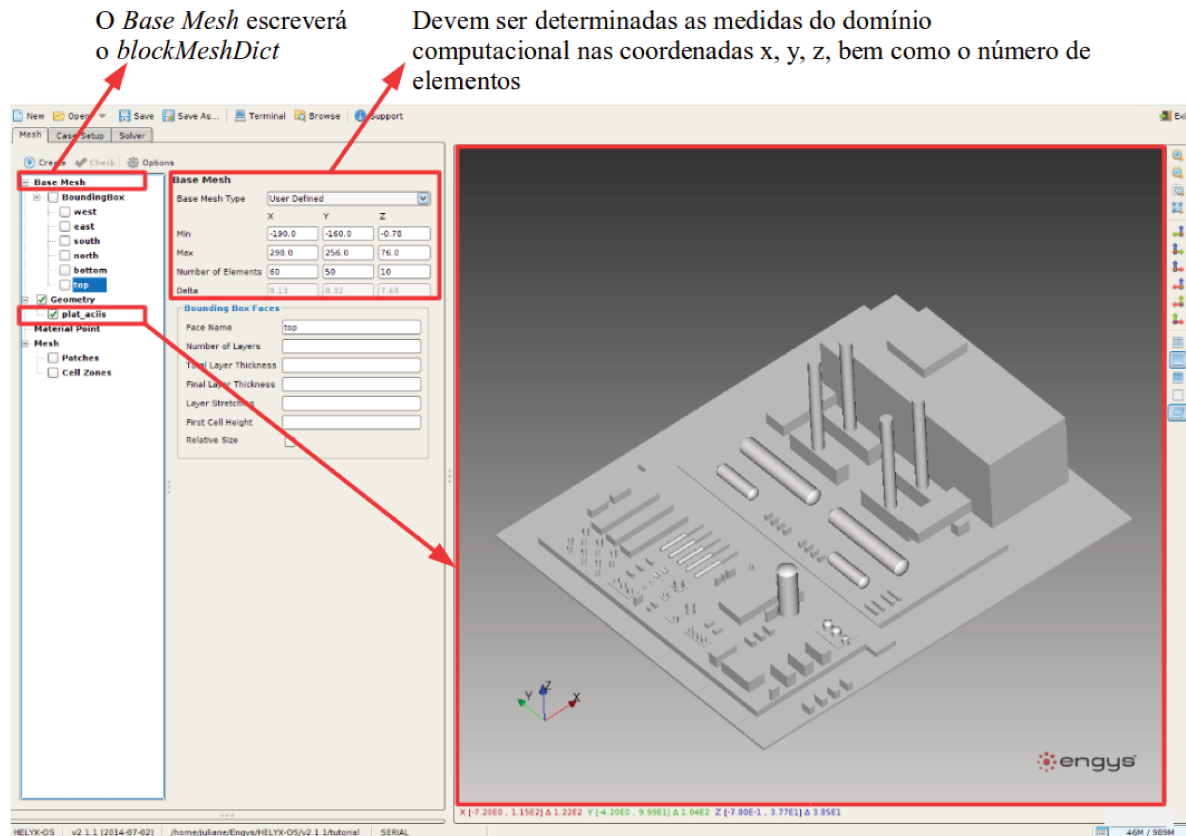


Figura A.4: Definição do domínio computacional.

Na Figura A.5 pode ser verificado o domínio computacional. As superfícies que receberão as condições de contorno recebem um nome padrão (ffminx, ffiny, etc.), que devem ser editadas conforme Figura A.5.

Nomear as partes do domínio computacional para posterior aplicação das condições de contorno

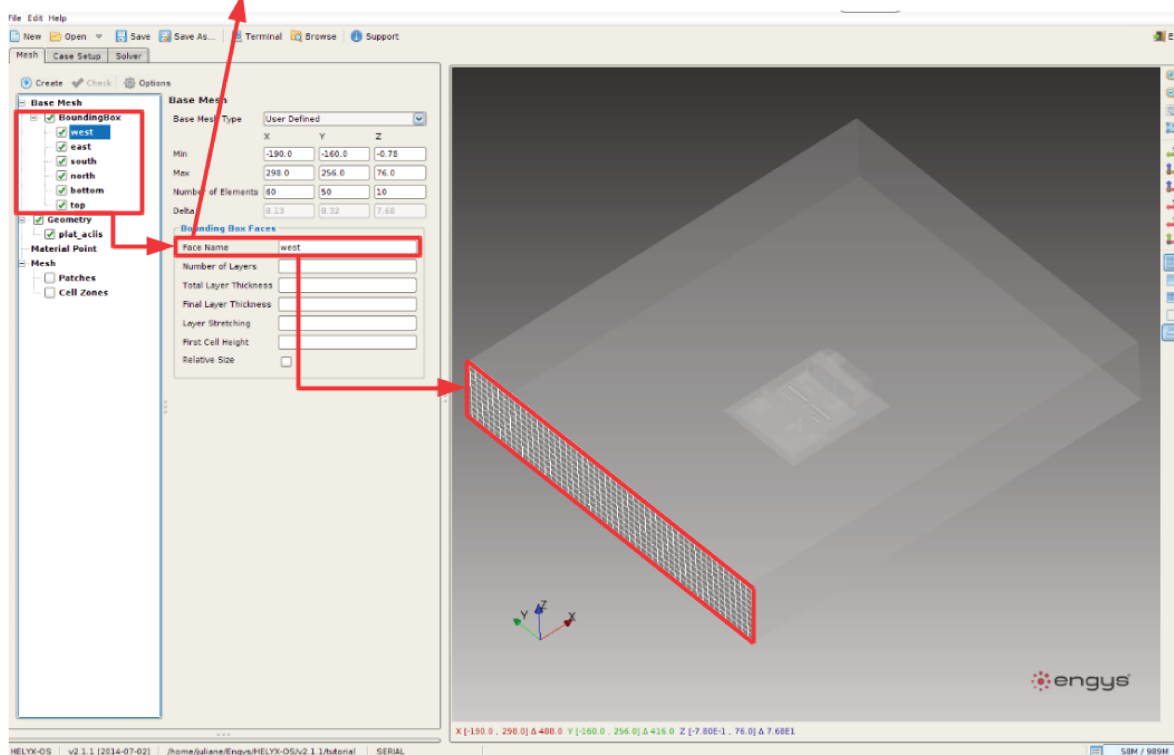


Figura A.5: Nomeação das superfícies do domínio.

Na sequência deve ser criada a geometria que posteriormente será utilizada para delimitar a região onde será executado o vazamento de gás. Conforme apresentado na Figura A.6.

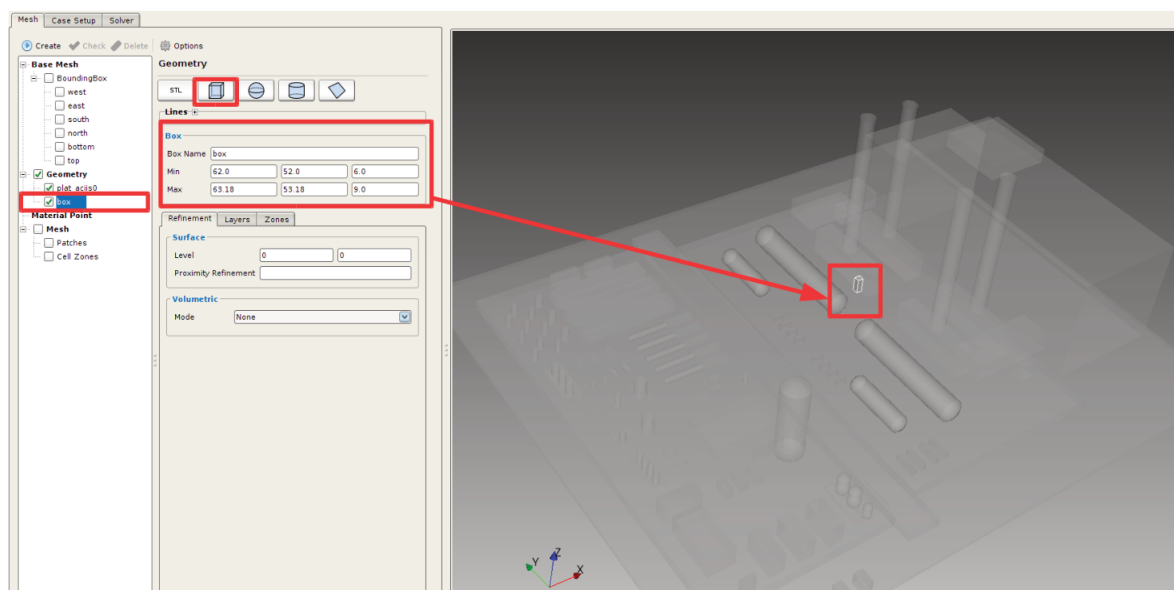


Figura A.6: Geração da geometria que dará suporte a região de vazamento de gás.

No sentido a capturar a região de vazamento com menor custo computacional optou-se em utilizar uma malha com regiões específicas de refinamento, este refinamento localizado deve ser executado conforme passos 1, 2, 3 e 4 das janelas apresentadas na Figura A.7. Na etapa 1,2 selecionar em *Geometry>box*, em 3 determinar a posição espacial do refinamento e em 4 determinar o nível de divisão da malha base, no *Cell Size* pode ser observado o tamanho da célula computacional que será obtida.

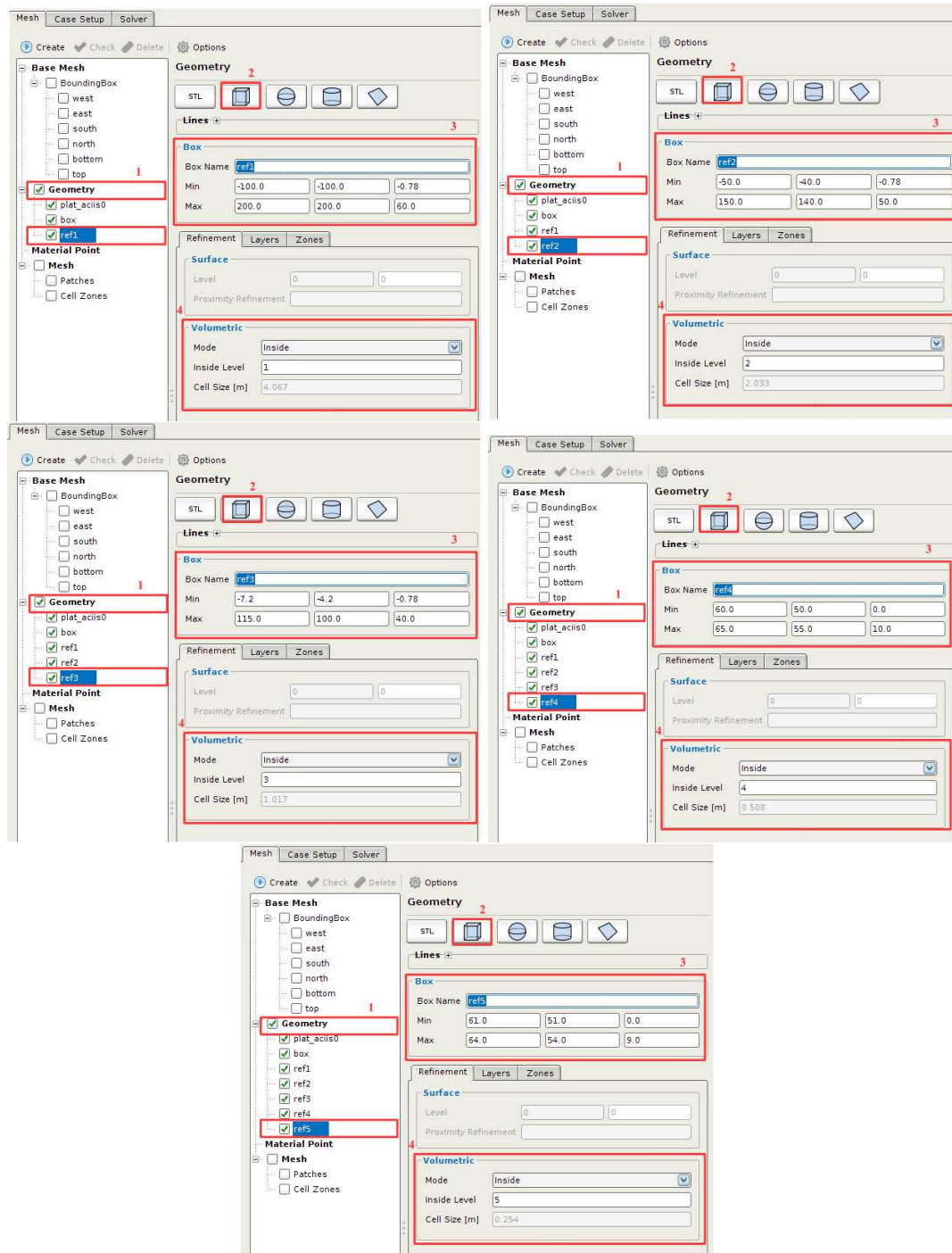


Figura A.7: Determinação das zonas de refinamento 1, 2, 3, 4 e 5.

Após deve ser determinada a região que será malhada, através da alocação do *Material Point*, que é utilizado pelo *snappyHexMesh* para orientação da geração da malha. Assim, ele deve estar contido dentro do domínio computacional, conforme mostrado na Figura A.8.

Deve ser dada as coordenadas do *Material Point*, que definirá a região a ser malhada. Este deve estar contido dentro do domínio computacional, como pode ser verificado pelo ponto vermelho.

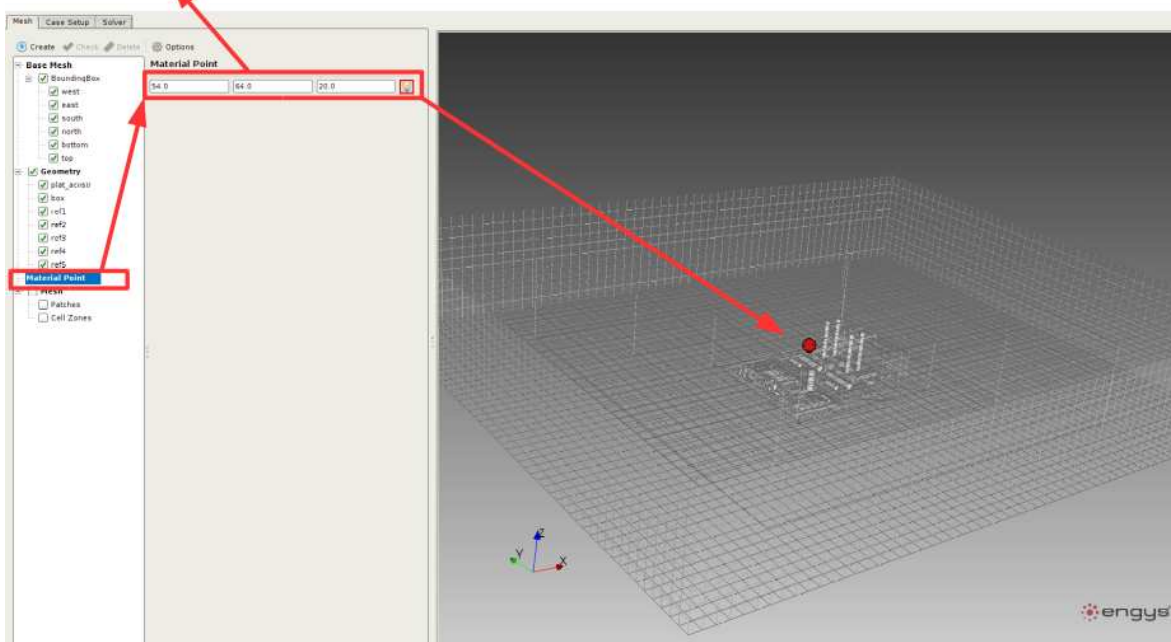


Figura A.8: Alocação do *Material Point*.

O próximo passo consiste na desabilitação das etapas de conformação e adição de camadas na malha. Assim, em *Options* desmarcar *Snapping* e *Layers Addition*. Esta medida reduz as zonas de não-ortogonalidade. Conforme passos 1 e 2 demonstrados na Figura A.9.

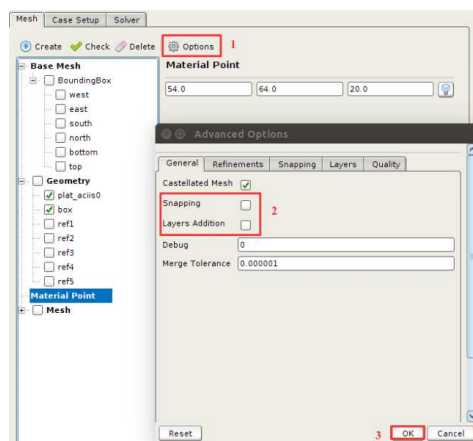


Figura A.9: Desabilitação do *Snapping* e do *Layers*.

Por fim, a geração da malha em *Mesh>Create*, conforme mostra a Figura A.10.

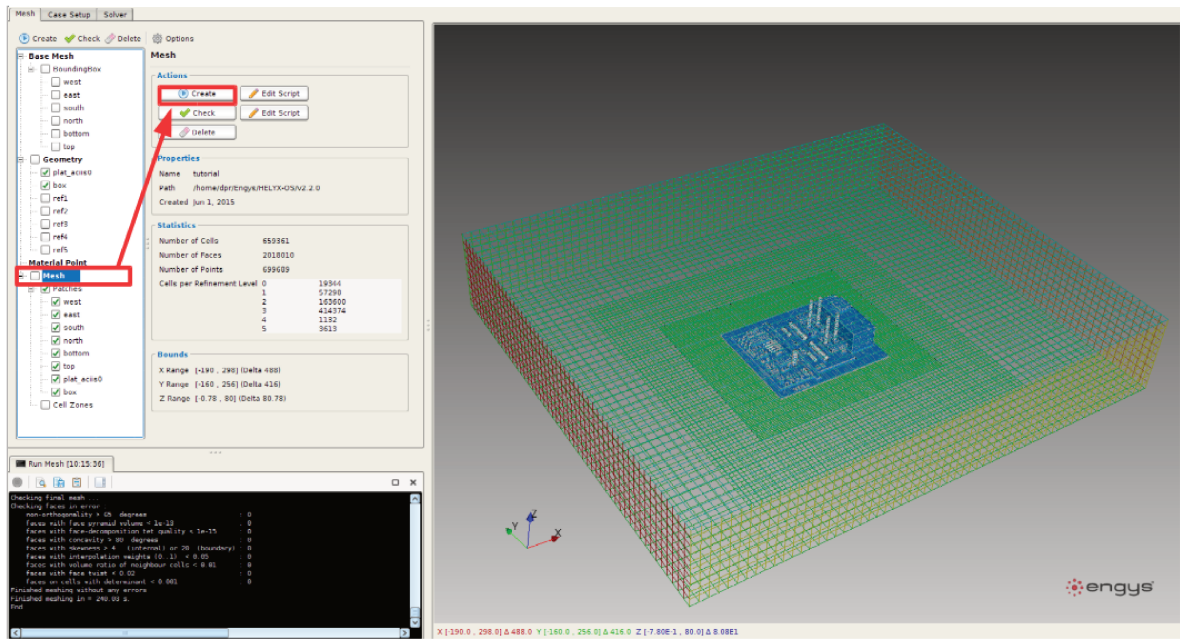


Figura A.10: Geração da malha.

Agora devem ser copiadas as definições do *solver* selecionado. Logo, deve-se criar um caso novo e copiar do caso tutorial *reactingFoam* as pastas *0*, *constant* e *system*. Conforme Figura A.11.

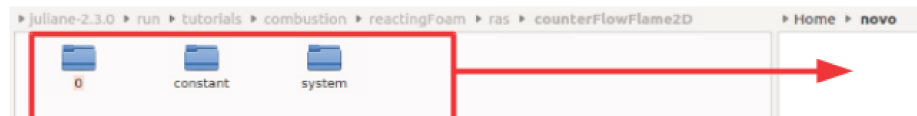


Figura A.11: Criação do novo caso e cópia dos arquivos do caso tutorial *reactingFoam*.

Dentro do caso tutorial criado no HELYX-OS® mover o arquivo *blockMeshDict* do diretório *system* para *constant>polyMesh*. Na sequência, copiar para o caso novo criado, as pastas *polyMesh* e *triSurface* contidas dentro da pasta *constant* do caso HELYX-OS® para a pasta *constant* do caso novo criado, assim como o arquivo *snappyHexMeshDict* da pasta *system* do caso HELYX-OS® para a pasta *system* do caso novo. Conforme demonstra a Figura A.12.

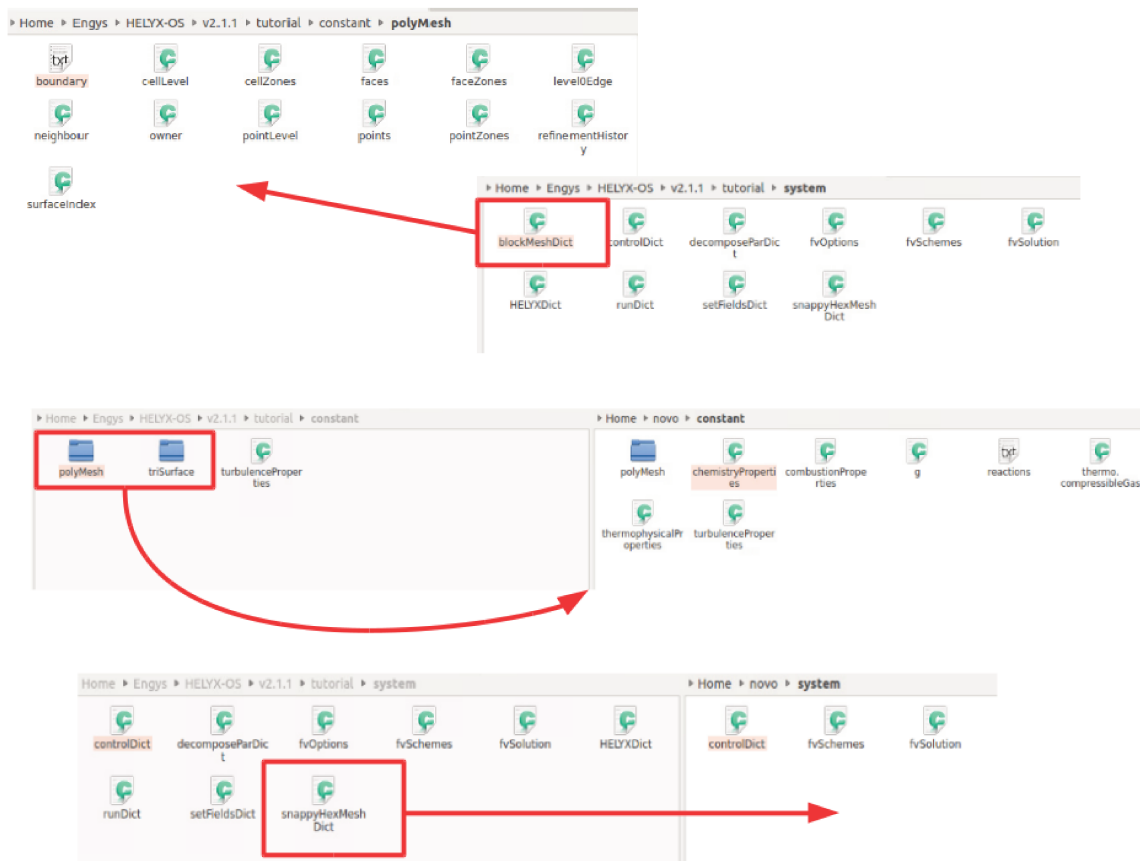


Figura A.12: Cópia dos arquivos de malha gerados no HELYX-OS® para o caso novo.

Agora dentro da pasta do caso novo, editar o arquivo do *blockMeshDict* criado pelo HELYX-OS®, modificando o tipo de condição de *wall* para *patch* onde será aplicada a condição de ventilação, conforme mostra a Figura A.13

<pre> wall west ((0 4 7 3)) wall east ((1 2 6 5)) wall south ((0 1 5 4)) wall north ((3 7 6 2)) wall bottom ((0 3 2 1)) wall top ((4 5 6 7)) </pre>		<pre> patch west ((0 4 7 3)) patch east ((1 2 6 5)) patch south ((0 1 5 4)) patch north ((3 7 6 2)) wall bottom ((0 3 2 1)) patch top ((4 5 6 7)) </pre>
---	--	--

Figura A.13: Edição do arquivo *blockMeshDict*.

Após, deve ser criada a região onde será aplicada a condição de contorno para o vazamento de gás. Para isso deve ser copiado do tutorial do OpenFOAM *combustion>fireFoam>les>smallPoolFire3D>system* os arquivos *createPatchDict* e *topoSetDict*. Como demonstrado Figura A.14. O arquivo *topoSetDict* deve ser editado conforme mostra a Figura A.15, já o *createPatchDict* não precisa ser modificado.

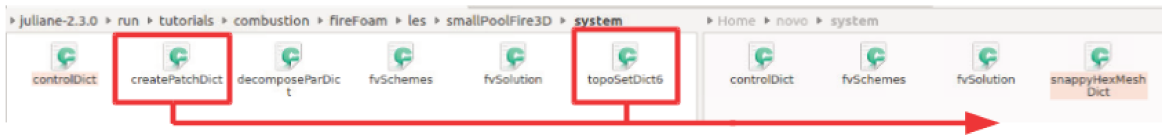


Figura A.14: Cópia dos arquivos para delimitação da região de vazamento.

```
actions
(
  {
    name    f0;
    type    faceSet;
    action  new;
    source  boxToFace;
    sourceInfo
    {
      box (62.0 52.0 5.9) ( 63.18 53.18 6.0);
    }
  }
);
```

Figura A.15: Edição do arquivo *topoSetDict* para alocação do vazamento.

Agora a malha deve ser gerada novamente, para isso os seguintes comandos devem ser executados no terminal, dentro da pasta do caso:

1) Limpar o arquivo *polyMesh*:

```
foamClearPolyMesh
```

2) Gerar o domínio computacional:

```
blockMesh
```

3) Malhar a plataforma e gerar a superfície para alocar o vazamento:

```
snappyHexMesh -overwrite
```

4) Criar a região para aplicar a condição de vazamento de gás:

```
topoSet
```

```
createPatch -overwrite
```

O último passo é a edição do arquivo *boundary* que está dentro da pasta *constant>polyMesh*. No qual devem ser agrupadas as superfícies que receberão a mesma condição de contorno, isso facilitará a edição da pasta 0. Conforme Figura A.16.

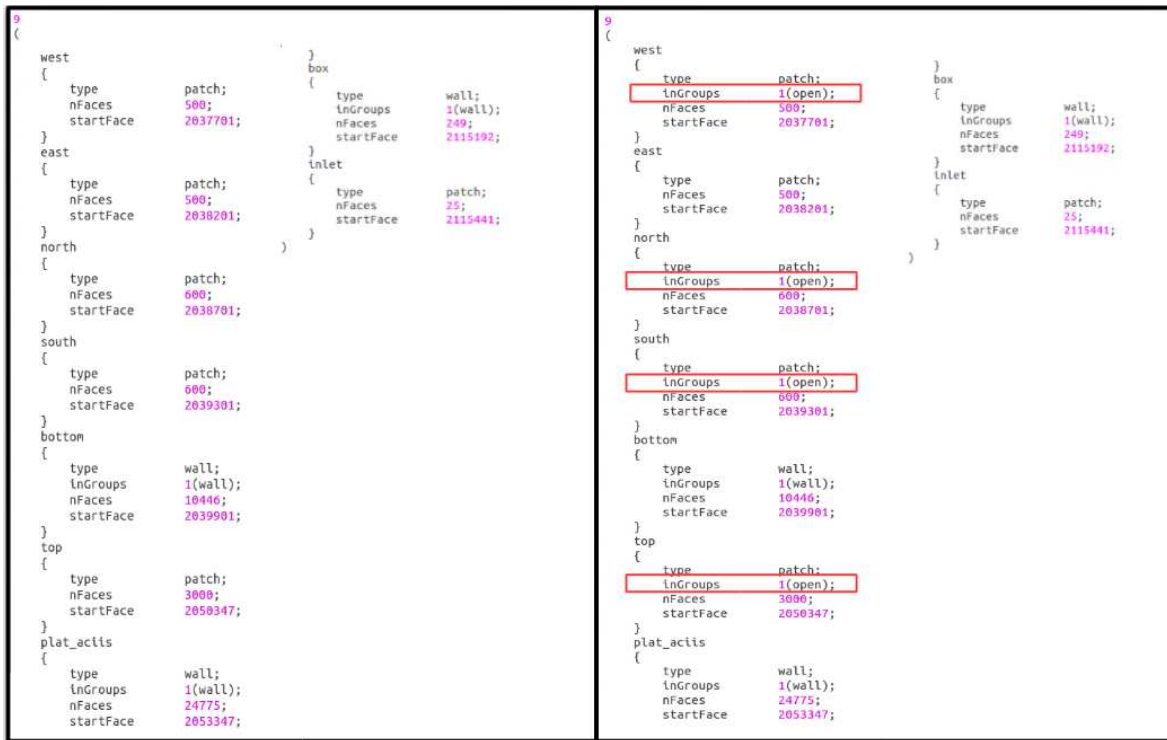


Figura A.16: Edição do arquivo *boundary* para agrupar condições de contorno.

Quando forem modificadas a região do refinamento, o *snappyHexMeshDict* ou a região de vazamento, utilizar o comando:

```
foamCleanTutorials
```

para limpar os arquivos de malha, sem a necessidade de editar novamente o *boundary* e executar novamente as etapas de 2, 3 e 4.

A.2 Propriedades, Esquemas Numéricos e Controle da Simulação

Após a definição da geometria e malha, deve ser realizada a customização das propriedades, com a finalidade de desativar a combustão e simular a dispersão de gás. Todos os arquivos contidos na pasta *constant* devem ser editados, seguindo a sequência da Figura A.17. Estas modificações serão explicadas em maiores detalhes a seguir.



Figura A.17: Arquivos que contêm as propriedades e que devem ser modificados.

A primeira etapa consiste na desativação da combustão e na mudança da forma de cálculo utilizada pelo pacote termodinâmico, que neste caso é baseado no tipo de *solver*. Esta modificação está demonstrada na Tabela A.1.

Tabela A.1: Propriedades Químicas (*chemistryProperties*)

Variável	<i>reactingFoam</i>	<i>rhoReactingBuoyantFoam</i>
<i>chemistryThermochemistry</i>	<i>psi</i> <i>on</i>	<i>rho</i> <i>off</i>

Após, devem ser modificadas as propriedades de combustão para desativar o modelo de combustão.

Tabela A.2: Propriedades de Combustão (*combustionProperties*)

Variável	<i>reactingFoam</i>	<i>rhoReactingBuoyantFoam</i>
<i>combustionModel</i>	<i>laminar</i> < <i>psiChemistryCombustion</i> >	<i>noCombustion</i> < <i>rhoThermoCombustion</i> >
<i>active</i>	<i>true</i> <i>laminarCoeffs</i>	Apagar toda a linha <i>noCombustionCoeffs</i>

Deve ser considerada a força da gravidade que não é contabilizada na versão original. Atenção deve ser dada a este ponto, tendo em vista que o OpenFOAM gera malhas, na qual a gravidade está em geral na direção -y, como pode ser visto na Tabela A.3, não é o que acontece neste caso, pois a geometria foi gerada em outra ferramenta.

Tabela A.3: Aceleração da Gravidade (*g*)

Variável	<i>reactingFoam</i>	<i>rhoReactingBuoyantFoam</i>
<i>value</i>	(0 0 0)	(0 0 -9.8)

Além da desativação da combustão, deve ser retirada a reação química, bem como

as espécies que não estarão envolvidas no fenômeno da dispersão. Conforme demonstrado na Tabela A.4.

Tabela A.4: Reações (*reactions*)

Variável	<i>reactingFoam</i>	<i>rhoReactingBuoyantFoam</i>
<i>species</i>	O2, H2O, CH4, CO2, N2	O2, CH4, N2
<i>reactions</i>	<pre> methaneReaction { type irreversibleArrheniusReaction; reaction "CH4 + 2O2 = CO2 + 2H2O"; A 5.2e16; beta 0; Ta 14906; } </pre>	{ }

Já no arquivo *thermo.compressibleGas* devem apagados os dados do modelo *janaf* e *sutherland* dos componentes: CO_2 e H_2O .

E no arquivo *thermophysicalProperties* duas modificações devem ser feitas: colocar todos os componentes como inertes e mudar o tipo, conforme demonstrado na Tabela A.5.

Tabela A.5: Propriedades Termofísicas (*thermophysicalProperties*)

Variável	<i>reactingFoam</i>	<i>rhoReactingBuoyantFoam</i>
<i>type</i>	<i>hePsiThermo</i>	<i>heRhoThermo</i>
<i>mixture</i>	<i>reactingMixture</i>	<i>reactingMixture</i>
<i>transport</i>	<i>sutherland</i>	<i>sutherland</i>
<i>thermo</i>	<i>janaf</i>	<i>janaf</i>
<i>energy</i>	<i>sensibleEnthalpy</i>	<i>sensibleEnthalpy</i>
<i>equationOfState</i>	<i>perfectGas</i>	<i>perfectGas</i>
<i>specie</i>	<i>specie</i>	<i>specie</i>
<i>inertSpecie</i>	N2	N2 O2 CH4

O próximo arquivo a ser modificado é o de turbulência, pois o caso original apresenta regime laminar, assim deve ser incluído a abordagem da turbulência que neste caso é a RANS. Como disposto na Tabela A.6.

Tabela A.6: Propriedades de Turbulência (*turbulenceProperties*)

Variável	<i>reactingFoam</i>	<i>rhoReactingBuoyantFoam</i>
<i>simulationType</i>	<i>laminar</i>	<i>RASModel</i>

Assim, deve ser adicionado ao caso, o tipo de modelo de turbulência para a abordagem RANS que será utilizado, conforme Tabela A.7. Este arquivo pode ser copiado de outro caso tutorial do OpenFOAM, como *tutorials>incompressible> pimpleFoam>pitzDaily>constant>RASProperties*, o qual utiliza o modelo *kEpsilon*, por exemplo.

Tabela A.7: Propriedade do Modelo RANS (*RASProperties*)

Variável	<i>rhoReactingBuoyantFoam</i>	
<i>RASModel</i>	<i>kEpsilon</i>	<i>kOmegaSST</i>
<i>turbulence</i>	<i>on</i>	<i>on</i>
<i>printCoeffs</i>	<i>on</i>	<i>on</i>

Os esquemas numéricos, estão contidos dentro da pasta *constant*, os quais devem ser customizados, conforme demonstrado nas Figuras A.18 e A.20.

```

ddtSchemes
{
    default Euler;
}

gradSchemes
{
    default Gauss linear;
}

divSchemes
{
    default none;
    div(phi,U) Gauss limitedLinearV 1;
    div(phi,Yi_h) Gauss limitedLinear 1;
    div(phi,K) Gauss limitedLinear 1;
    div(phiId,p) Gauss limitedLinear 1;
    div(phi,epsilon) Gauss limitedLinear 1;
    div(phi,k) Gauss limitedLinear 1;
    div((muEff*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;
}

laplacianSchemes
{
    default Gauss linear orthogonal;
}

interpolationSchemes
{
    default linear;
}

snGradSchemes
{
    default orthogonal;
}

fluxRequired
{
    default no;
    p;
}

```

```

ddtSchemes
{
    default Euler;
}

gradSchemes
{
    default Gauss linear;
}

divSchemes
{
    default none;
    div(phi,U) Gauss upwind;
    div(phi,Yi_h) Gauss upwind;
    div(phi,K) Gauss upwind;
    div(phiId,p) Gauss upwind;
    div(phiId,p_rgh) Gauss upwind;
    div(phi,epsilon) Gauss upwind;
    div(phi,omega) Gauss upwind;
    div(phi,k) Gauss upwind;
    div((muEff*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;
}

laplacianSchemes
{
    default Gauss linear corrected;
}

interpolationSchemes
{
    default linear;
}

snGradSchemes
{
    default corrected;
}

fluxRequired
{
    default no;
    p_rgh;
}

```

Figura A.18: Edição do arquivo *fvScheme* para dispersão.

Copiar o arquivo *fvSolution* do tutorial do OpenFOAM *combustion>fireFoam>les>smallPoolFire3D>system*, assim substituindo o arquivo já existente, como demonstrado Figura A.19.

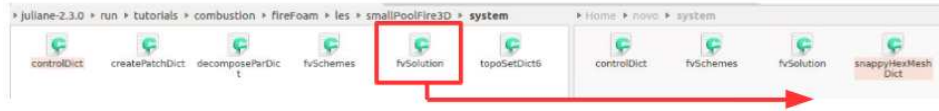


Figura A.19: Cópia do arquivo *fvSolution*.

O arquivo copiado *fvSolution* deve ser editado, adicionando a resolução dos arquivos de turbulência e apagando os arquivos *Ii*, *G* e *relaxationFactors*, conforme demonstrado na Figura A.20.

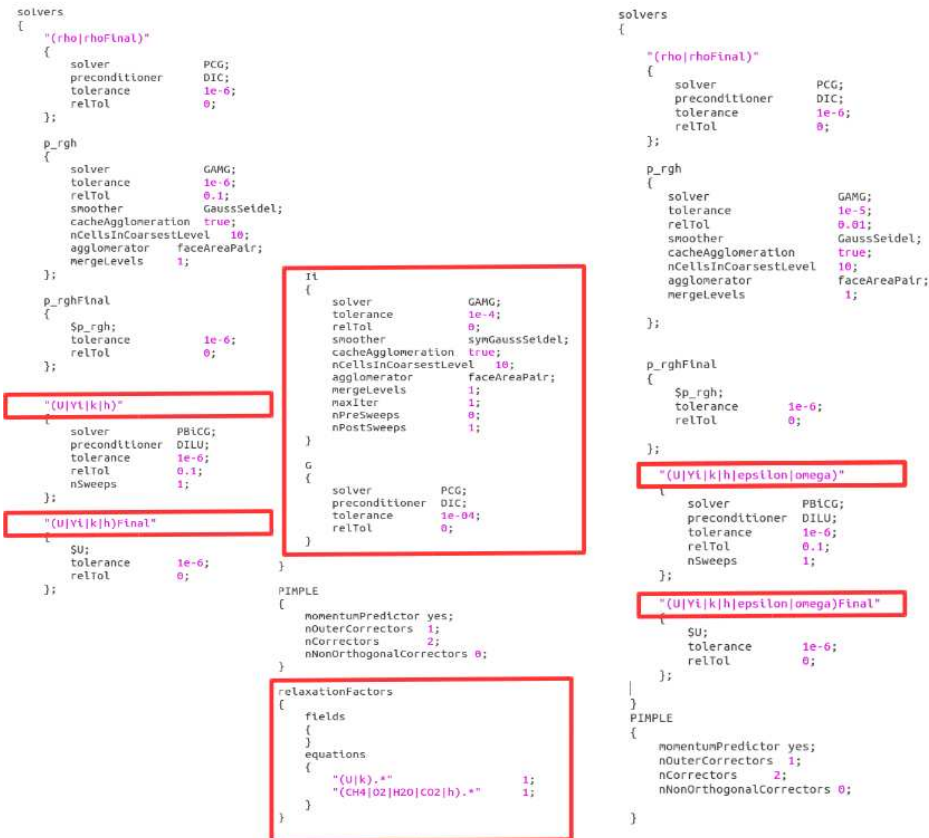


Figura A.20: Edição do arquivo *fvSolution* para dispersão.

Na parte de controle da simulação, que é realizada por meio do arquivo *controlDict*, deve ser utilizado *maxCo* de 10,0 quando utiliza-se a abordagem $\kappa - \omega$ SST e 1,0 quando utiliza-se $\kappa - \varepsilon$, essa medida é tomada no sentido à acelerar o tempo de simulação computacional.

A.3 Condições de Contorno

Com relação a condição de contorno, estas devem ser modificadas em todos os arquivos contidos na pasta 0, conforme demonstrado nas Figuras A.21, A.22 e A.23.

```
// *****
//alphat
dimensions      [1 -1 -1 0 0 0];
internalField    uniform 0;
boundaryField
{
    wall
    {
        type      compressible::alphatWallFunction;
        Prt       0.85;
        value      uniform 0;
    }
    inlet
    {
        type      calculated;
        value      uniform 0;
    }
    east
    {
        type      calculated;
        value      uniform 0;
    }
    open
    {
        type      calculated;
        value      uniform 0;
    }
}

// *****
//CH4
dimensions      [0 0 0 0 0 0];
internalField    uniform 0.0;
boundaryField
{
    wall
    {
        type      zeroGradient;
    }
    inlet
    {
        type      fixedValue;
        value      uniform 1.0;
    }
    east
    {
        type      fixedValue;
        value      uniform 0.0;
    }
    open
    {
        type      inletOutlet;
        inletValue  uniform 0.0;
        value       uniform 0.0;
    }
}

// *****
//N2
dimensions      [0 0 0 0 0 0];
internalField    uniform 0.79;
boundaryField
{
    wall
    {
        type      zeroGradient;
    }
    inlet
    {
        type      fixedValue;
        value      uniform 0.0;
    }
    east
    {
        type      fixedValue;
        value      uniform 0.79;
    }
    open
    {
        type      inletOutlet;
        inletValue  uniform 0.79;
        value       uniform 0.79;
    }
}

// *****
//O2
dimensions      [0 0 0 0 0 0];
internalField    uniform 0.21;
boundaryField
{
    wall
    {
        type      zeroGradient;
    }
    inlet
    {
        type      fixedValue;
        value      uniform 0.0;
    }
    east
    {
        type      fixedValue;
        value      uniform 0.21;
    }
    open
    {
        type      inletOutlet;
        inletValue  uniform 0.21;
        value       uniform 0.21;
    }
}

// *****
```

Figura A.21: Arquivos de condição de contorno - alphat, CH4, N2 e O2.

```

// ***** //
//epsilon
dimensions      [0 2 -3 0 0 0];
internalField    uniform 0.1;
boundaryField
{
    inlet
    {
        type      zeroGradient;
    }
    wall
    {
        type      compressible::epsilonWallFunction;
        value      $internalField;
    }
    open
    {
        type      zeroGradient;
    }
    east
    {
        type      zeroGradient;
    }
}

// ***** //
//k
dimensions      [0 2 -2 0 0 0];
internalField    uniform 0.01;
boundaryField
{
    inlet
    {
        type      zeroGradient;
    }
    east
    {
        type      zeroGradient;
    }
    wall
    {
        type      compressible::kqRWallFunction;
        value      uniform 0.01;
    }
    open
    {
        type      zeroGradient;
    }
}

// ***** //
//mut
dimensions      [1 -1 -1 0 0 0];
internalField    uniform 0.0;
boundaryField
{
    wall
    {
        type      mutkWallFunction;
        Cmu      0.09;
        kappa     0.41;
        E         9.8;
        value      uniform 0;
    }
    inlet
    {
        type      calculated;
        value      uniform 0;
    }
    east
    {
        type      calculated;
        value      uniform 0;
    }
    open
    {
        type      calculated;
        value      uniform 0;
    }
}

// ***** //
//Ydefault
dimensions      [0 0 0 0 0 0];
internalField    uniform 0.0;
boundaryField
{
    wall
    {
        type      zeroGradient;
    }
    inlet
    {
        type      fixedValue;
        value      uniform 0.0;
    }
    open
    {
        type      inletOutlet;
        inletValue  uniform 0.0;
        value       uniform 0.0;
    }
    east
    {
        type      fixedValue;
        value      uniform 0.0;
    }
}

// ***** //

```

Figura A.22: Arquivos de condição de contorno - epsilon, k, mut, Ydefault.

Nota: Quando utiliza-se a abordagem $\kappa - \omega$ SST utilizar o arquivo omega similar ao epsilon, com as seguintes condições de contorno:

```

boundaryField
{
    wall
    {
        type      compressible::omegaWallFunction;
        value      uniform 0.1;
        Cmu      0.09;
        kappa     0.41;
        E         9.8;
    }
    inlet
    {
        type      zeroGradient;
    }
    east
    {
        type      zeroGradient;
    }
    open
    {
        type      zeroGradient;
    }
}

```

```

// ***** //
//T
dimensions [0 0 0 1 0 0 0];
internalField uniform 297;
boundaryField
{
    wall
    {
        type zeroGradient;
    }
    inlet
    {
        type value;
        fixedValue;
        uniform 297;
    }
    east
    {
        type value;
        fixedValue;
        uniform 297;
    }
    open
    {
        type inletOutlet;
        inletValue uniform 297;
        value uniform 297;
    }
}

// ***** //
//U
dimensions [0 1 -1 0 0 0 0];
internalField uniform (-6 0 0);
boundaryField
{
    wall
    {
        type value;
        fixedValue;
        uniform (0 0 0);
    }
    inlet
    {
        type value;
        fixedValue;
        uniform (0 0 -100);
    }
    east
    {
        type value;
        fixedValue;
        uniform (-6 0 0);
    }
    open
    {
        type pressureInletOutletVelocity;
        value phi;
        phi;
    }
}

// ***** //
//p
dimensions [1 -1 -2 0 0 0 0];
internalField uniform 101325;
boundaryField
{
    wall
    {
        type value;
        calculated;
        $internalField;
    }
    inlet
    {
        type value;
        calculated;
        $internalField;
    }
    east
    {
        type value;
        calculated;
        $internalField;
    }
    open
    {
        type value;
        calculated;
        $internalField;
    }
}

// ***** //
//p_rgh
dimensions [1 -1 -2 0 0 0 0];
internalField uniform 101325;
boundaryField
{
    east
    {
        type zeroGradient;
    }
    inlet
    {
        type zeroGradient;
    }
    open
    {
        type totalPressure;
        p0 $internalField;
        U;
        phi phi;
        rho rho;
        psi none;
        gamma 0;
        value $internalField;
    }
    wall
    {
        type fixedFluxPressure;
        value $internalField;
    }
}

// ***** //

```

Figura A.23: Arquivos de condição de contorno - T, U, p, p_rgh.

A.4 Pós-Processamento - Geração da nuvem

A etapa de geração da nuvem é realizada por meio do pós-processamento que é executado no ParaView. Na primeira etapa, deve ser executada a conversão da fração mássica para molar, para isto, utilizando o utilitário *Calculator*, deve ser implementada uma equação de balanço de massa conforme demonstrado na Figura A.24.

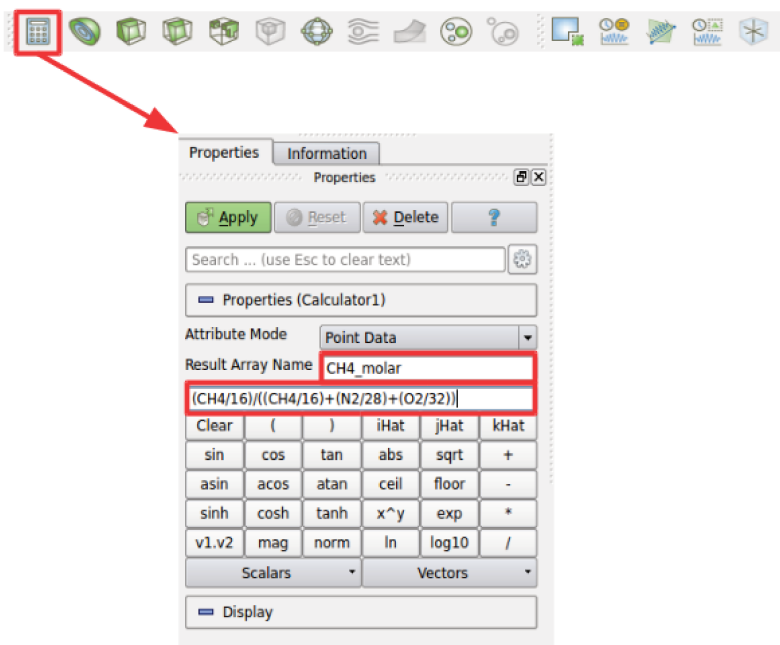


Figura A.24: Conversão da fração mássica para molar no Paraview.

Para determinação da nuvem, deve ser selecionada a ferramenta de isovolume. Assim em *Filters>Search>IsoVolume*, como mostra a Figura A.25.

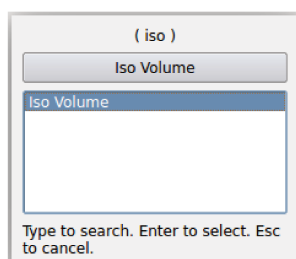


Figura A.25: Seleção do utilitário *IsoVolume*.

Depois, deve ser selecionado a variável que será analisada, neste caso a fração molar do metano e a faixa de flamabilidade, que para o metano é de 0,05 a 0,15. Conforme demonstrado na Figura A.26.

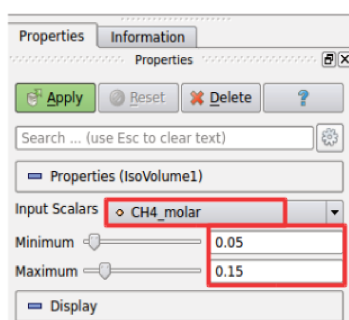


Figura A.26: Determinação da região de Isovolum.

Para o cálculo do volume, utiliza-se o utilitário *Integrate Variables*, o qual faz a integral do volume delimitado pelo isocontorno feito anteriormente. Assim o volume da nuvem é calculado, conforme mostrado na Figura A.27, também pode ser visualizada a nuvem formada, bem como o volume calculado na Figura A.28.

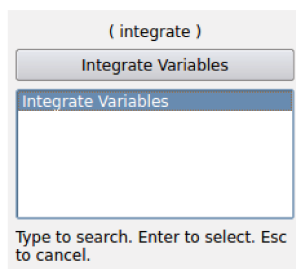


Figura A.27: Cálculo do volume da nuvem inflamável.

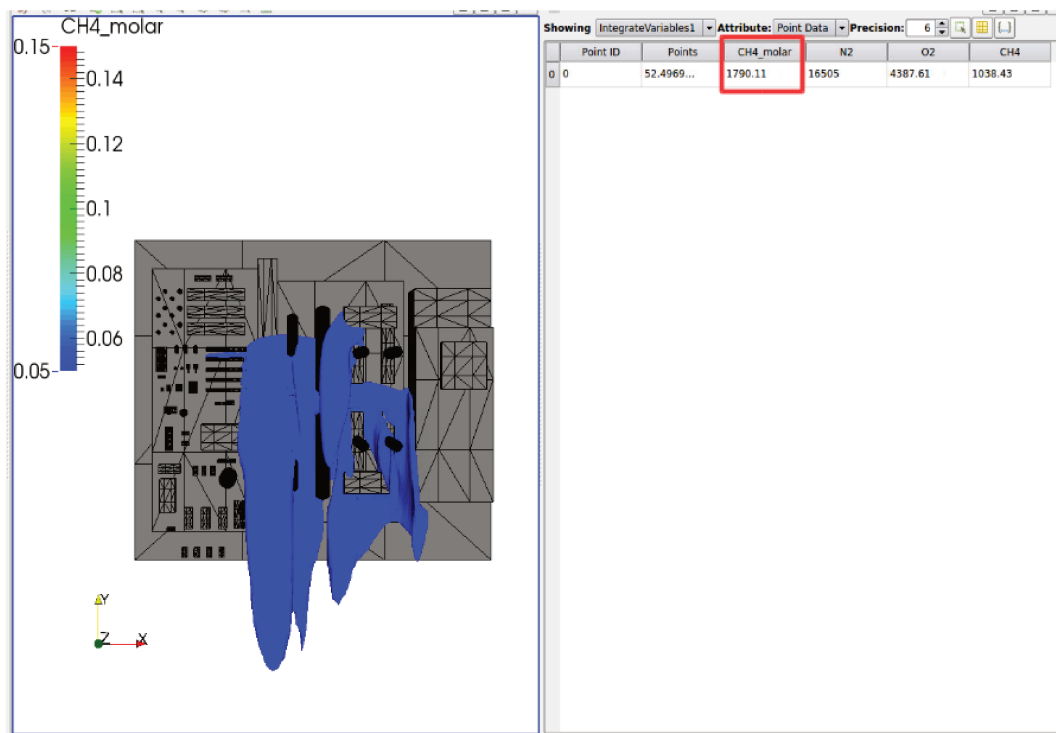


Figura A.28: Volume da nuvem inflamável.

Apêndice B

Procedimento de Engenharia para Simulação de Dispersão de Gás no ANSYS-CFX

Para criação de um caso de dispersão na ferramenta comercial ANSYS-CFX, é necessário como primeiro passo, a criação da geometria e malha, como no OpenFOAM. Depois vem a etapa de pré-processamento na qual são escolhidas as condições de contorno, bem como as definições físicas.

B.1 Geometria e Malha

A geometria e malha são gerados por outra ferramenta da ANSYS o ICEM. O primeiro passo para construção da geometria no ICEM é a geração de pontos, curvas e superfícies, nesta sequência. Sendo na Figura B.1, demonstrado pelos números 1, 2 e 3. Por meio do utilitário 3 da Figura B.1 é possível a criação de formas prontas agilizando este processo, o que está demonstrado pelo item 5. Para geração de geometrias prontas devem ser fornecidas as dimensões conforme item 6 da Figura B.1.

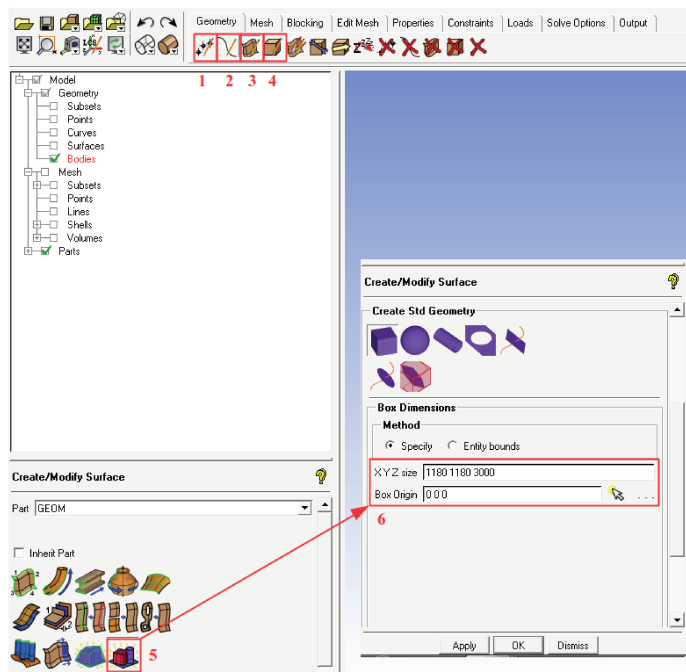


Figura B.1: Criação de geometrias no ICEM.

Depois da criação da geometria, devem ser criadas as partes, nas quais serão aplicadas as condições de contorno no CFX-Pre. Isto pode ser feito conforme demonstrado na Figura B.2. A Figura B.3 mostra a criação da superfície onde será executado o vazamento de gás, no item 1 deve ser nomeada a parte, no 2 é selecionada a superfície de interesse e na 3 está demonstrada a criação da parte.

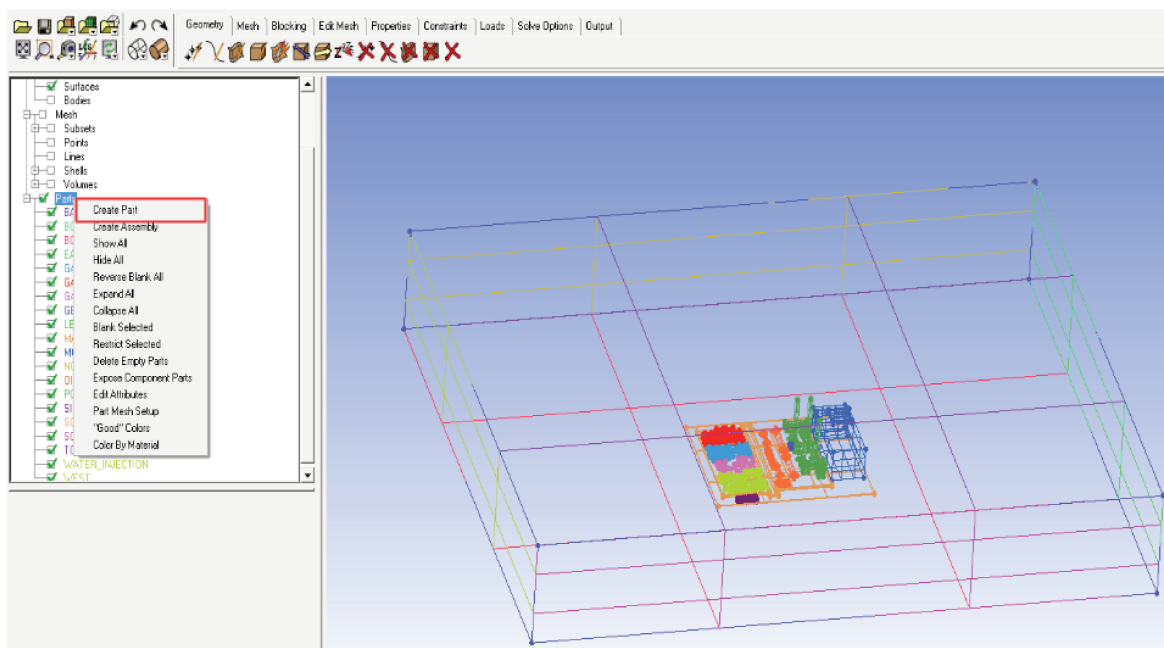


Figura B.2: Criação da partes para aplicação da condição de contorno.

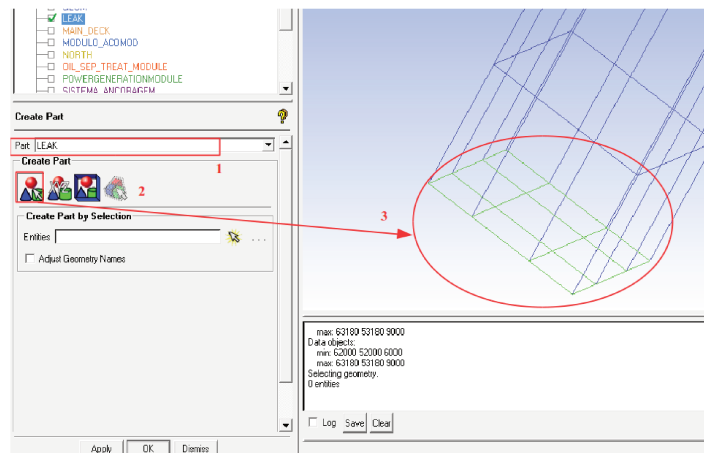


Figura B.3: Especificação da superfície para aplicação da condição para vazamento de gás.

Após deve ser adicionado o *body*, o qual orientá-ra a geração da malha. O *body* pode ser criado entrando no ícone 4 da Figura B.1, após deve ser nomeado e selecionado dois pontos do domínio computacional, conforme itens 1 e 2 da Figura B.4, o item 3 mostra o *body* criado.

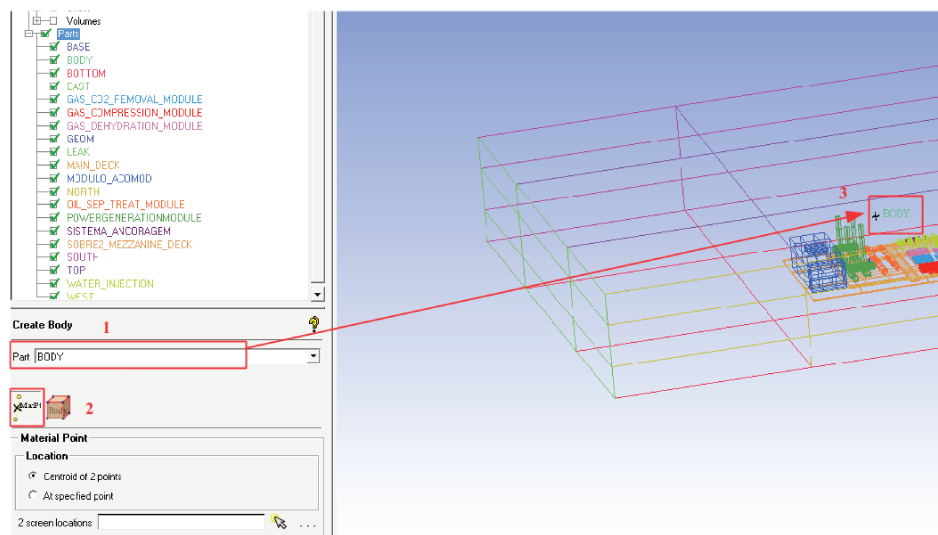


Figura B.4: Criação do *body*.

Após a criação da geometria, vem a etapa de geração de malha. No item 1 deve ser selecionada a taxa de crescimento (item 2) e o tamanho padrão máximo da célula (item 3). Também pode ser determinado o tamanho máximo das células para cada parte criada, o que pode ser feito no item 4 e 5. Todas estas etapas estão demonstradas na Figura B.5.

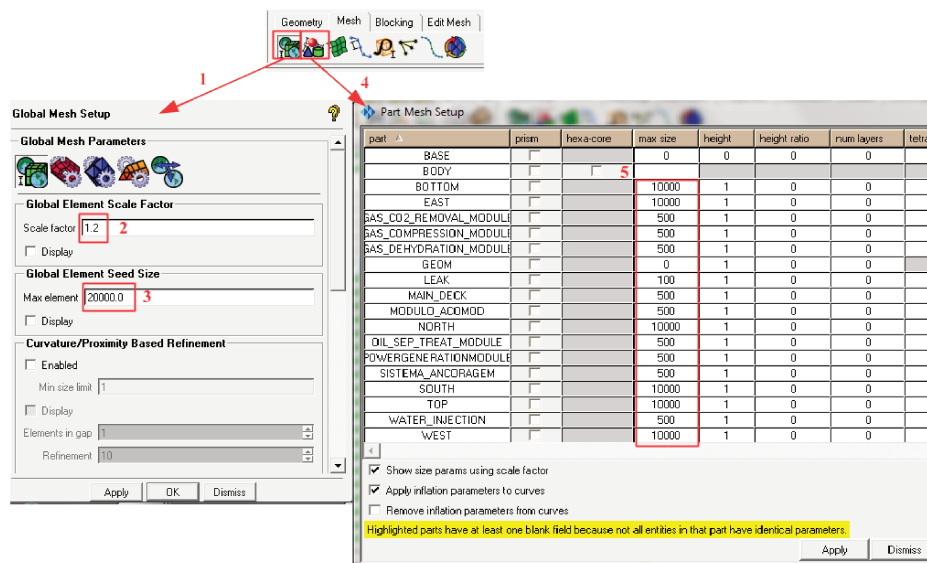


Figura B.5: Parâmetros para criação da malha no ICEM.

Na próxima etapa a malha é computada, conforme demonstrado na Figura B.6. Onde também pode ser verificada a malha gerada.

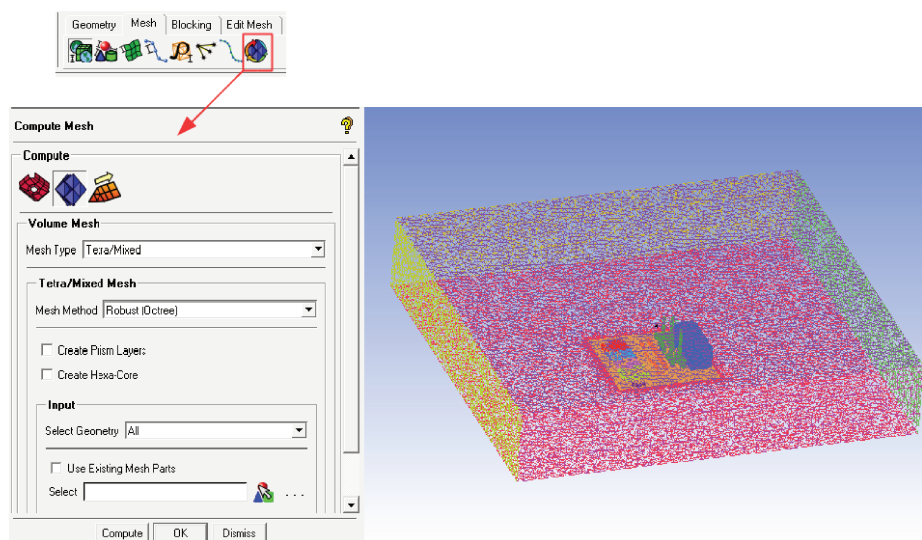


Figura B.6: Geração da malha no ICEM

Agora deve ser gerado o arquivo de saída que será importado no CFX-Pre. A primeira etapa é a seleção do formato de saída, o que está relacionado ao *solver* que será utilizado, neste caso é o ANSYS-CFX, conforme Figura B.7 (item 1). Após é exportada a malha, atenção deve ser dada a esta etapa, caso a geometria e malha tenham sido geradas em escala de milímetros, ela deve ser escalada para metros, conforme demonstrado no item 3 da Figura B.7.

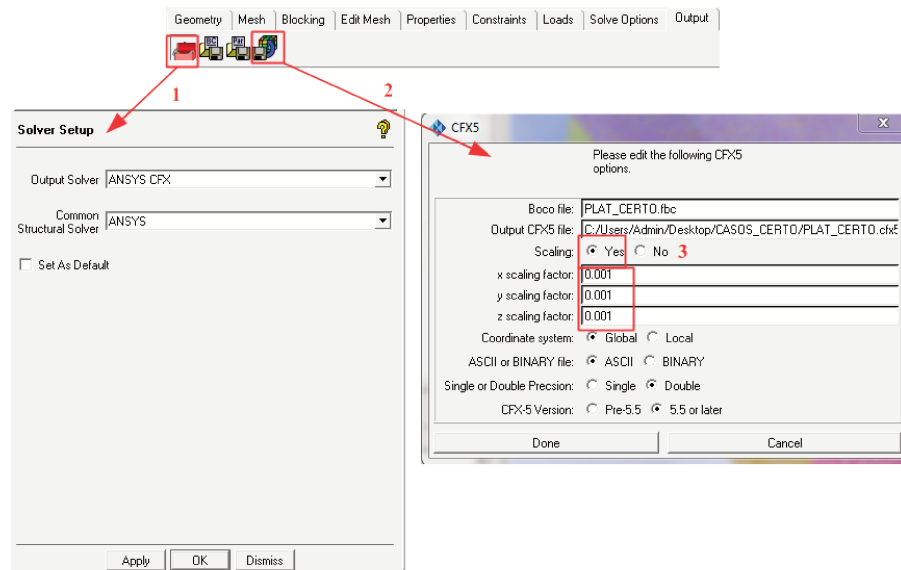


Figura B.7: Exportação da malha gerada no ICEM para o *solver* ANSYS-CFX.

Também pode ser exportada a malha em formato para importação no OpenFOAM, isto pode ser realizado por meio da exportação em formato para o *solver* Fluent, o qual é compatível com o OpenFOAM, o que está demonstrado na Figura B.8.

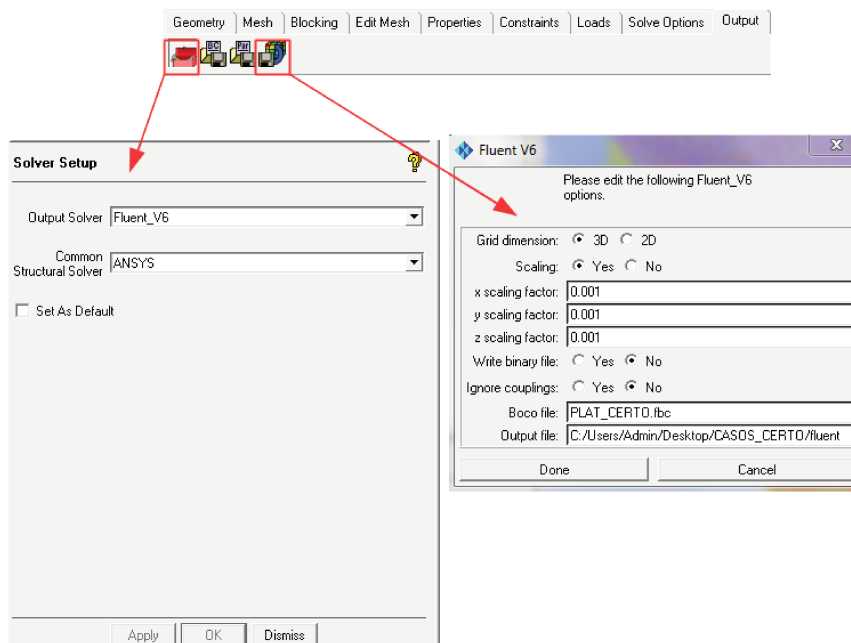


Figura B.8: Exportação da malha gerada no ICEM para o *solver* Fluent.

B.2 Pré-Processamento

Na Figura B.9 está demonstrada a estrutura do caso de dispersão montado na ferramenta ANSYS-CFX. A seguir cada etapa deste processo será descrita em maiores detalhes.

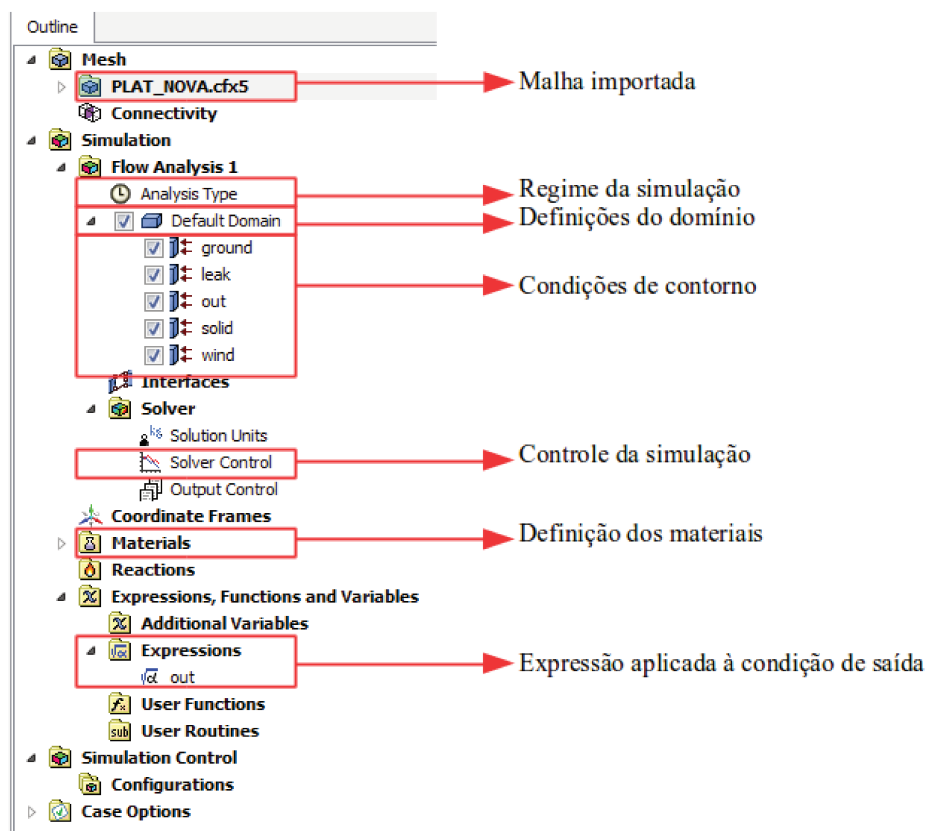


Figura B.9: Estrutura do caso de dispersão.

B.2.1 Importação da malha

O primeiro passo para construção de uma simulação no ANSYS-CFX consiste na importação da malha gerada no ICEM. O pode ser verificado na Figura B.10. Assim, com o botão direito entrar em *Import Mesh>ICEM CFD* e selecionar a malha gerada.

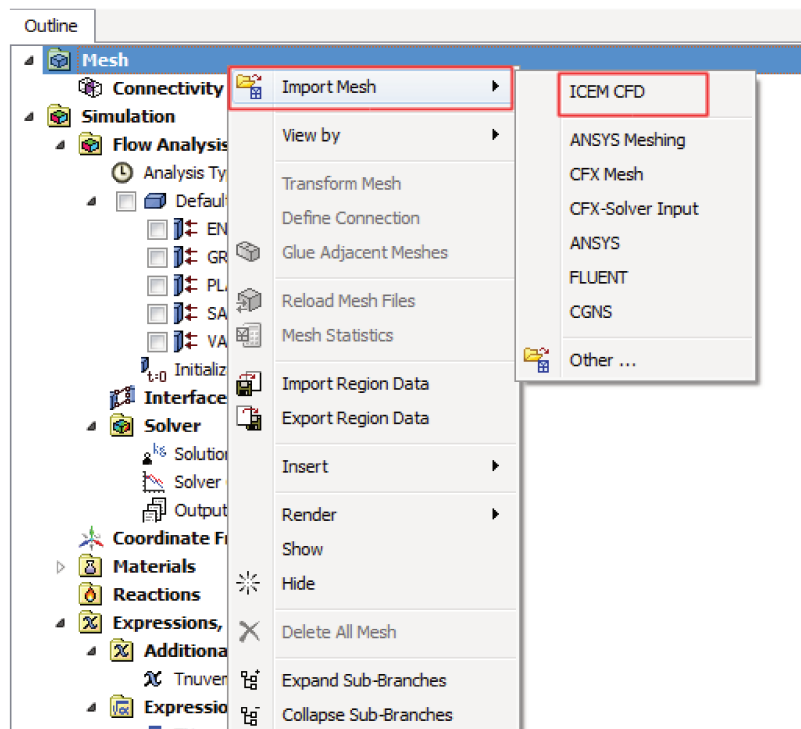


Figura B.10: Importação da malha.

B.2.2 Seleção do material

Depois deve ser inserido o material que será utilizado na simulação, que neste caso será uma mistura de gases, assim deve ser adicionado um material novo em *Materials* e nomeá-lo como *Mixture*, logo com o botão direito selecionar *Insert Material>Mixture*, conforme Figura B.11.



Figura B.11: Escolha do material.

O componente *Mixture*, será composto de ar e metano, para utilizar o metano deve-se escolher o pacote termodinâmico para seleção do componente. Assim, como mostrado na Figura B.12, seguir os passos de 1 a 7 para seleção do metano, por meio de dados do modelo *Peng-Robinson* e também adicionar o ar conforme item 8.

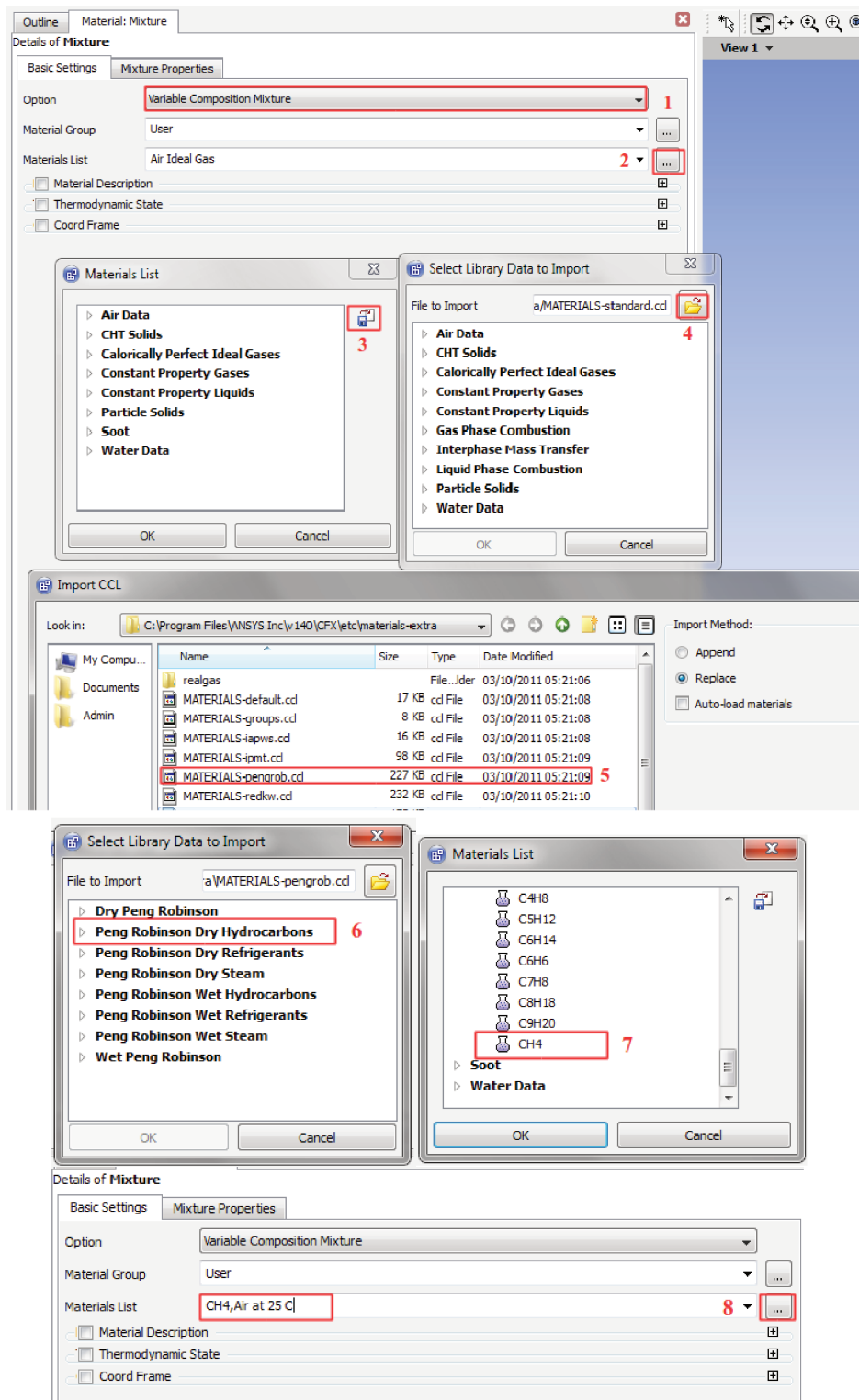


Figura B.12: Escolha dos gases.

B.2.3 Definições do domínio computacional

Depois da escolha dos materiais, devem ser determinados os parâmetros aplicados ao domínio computacional. A primeira etapa é a definição do tipo de análise, conforme pode ser verificado na Figura B.13, em *Option>Steady State*.



Figura B.13: Tipo de regime adotado.

Na sequência devem ser selecionadas as propriedades com relação ao fluido, assim em *Default Domain>Basic Settings>Domain Type>Fluid Domain e Fluid>Fluid 1*, conforme itens 1 e 2 da Figura B.14. Na opção com relação ao material, selecionar a mistura constituída em B.2.2, demonstrado no item 3 *Material>mix*. Também devem ser selecionados o *Buoyancy Model* e a gravidade, bem como a densidade de referência, conforme itens 4 e 5 da Figura B.14.

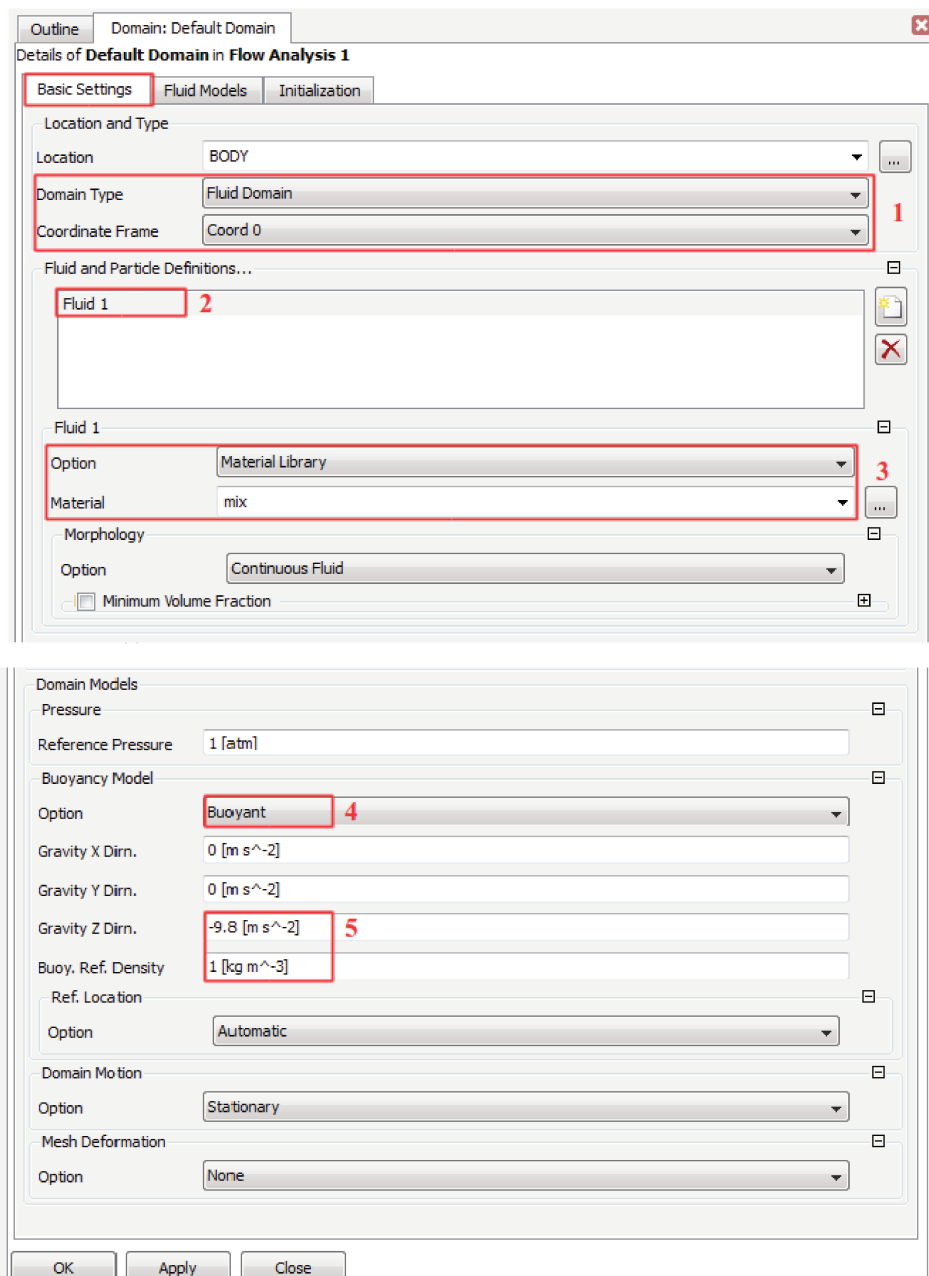


Figura B.14: Definições básicas do domínio computacional.

Já na aba *Fluid Models*, deve ser selecionado o modelo de transferência de calor, que neste caso será isotérmico, como mostra a Figura B.15 item 1. O modelo de turbulência adotado é o *kepsilon*, conforme itens 2 e 3. Esta etapa é idêntica para ambos os fluidos. Entretanto, atenção deve ser dada a escolha quanto ao modelo para cada componente, para o ar deve ser selecionado *Constraint* e para o metano *Transport Equation*, conforme itens 4 e 5 da Figura B.15.

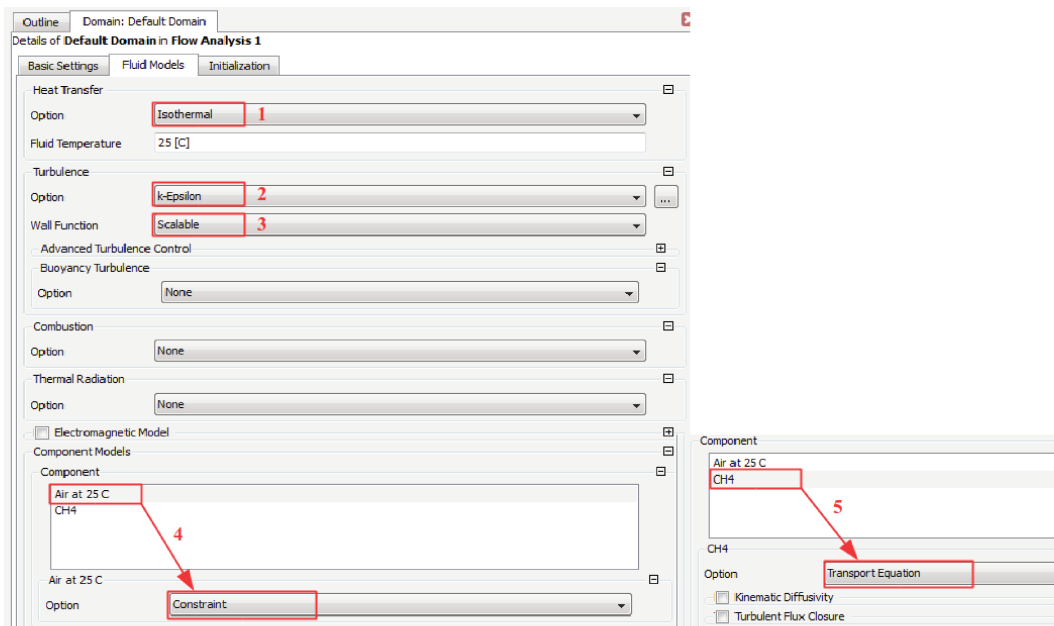


Figura B.15: Definições para os fluidos.

B.2.4 Condições de contorno

Na sequência deve ser adicionada uma expressão que deve ser aplicada na condição de contorno da superfícies de saída. Conforme demonstrado na Figura B.16 itens 1 e 2.

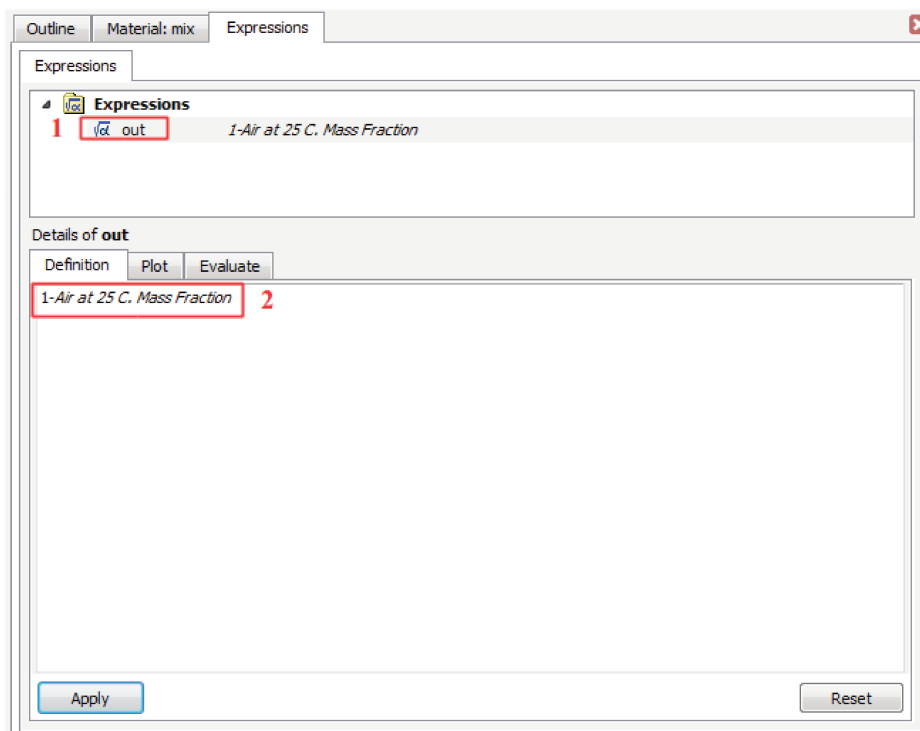


Figura B.16: Expressão aplicada na condição de saída.

Agora é realizada a seleção do tipo de condição de contorno a ser aplicada em cada superfície. Na região denominada *bottom*, na plataforma, bem como, na superfície que da suporte a região de vazamento de gás, foi adotada condição do tipo *wall*, sem escorregamento e lisa, conforme demonstrado nos itens 1 e 2 da Figura B.17. Estas superfícies foram agrupadas em *ground* e *solid* na Figura B.9.

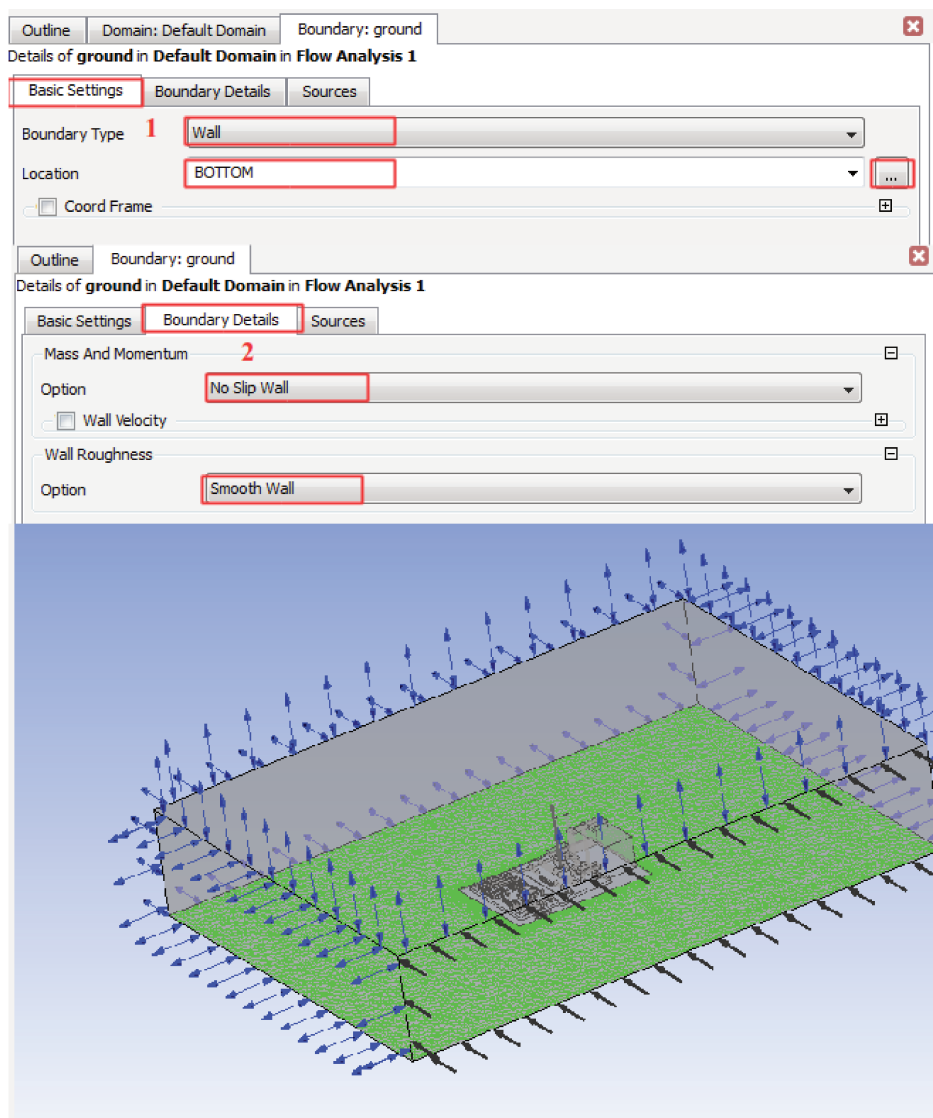


Figura B.17: Demonstração de aplicação da condição de contorno de parede.

Já a região de vazamento de gás foi nomeada como *leak*, como pode ser verificado na Figura B.9. A condição de contorno aplicada é do tipo *inlet*, o regime é subsônico. Deve ser estipulada a taxa mássica de descarga do metano e a fração mássica, como está demonstrado na Figura B.18 itens 1 e 2.

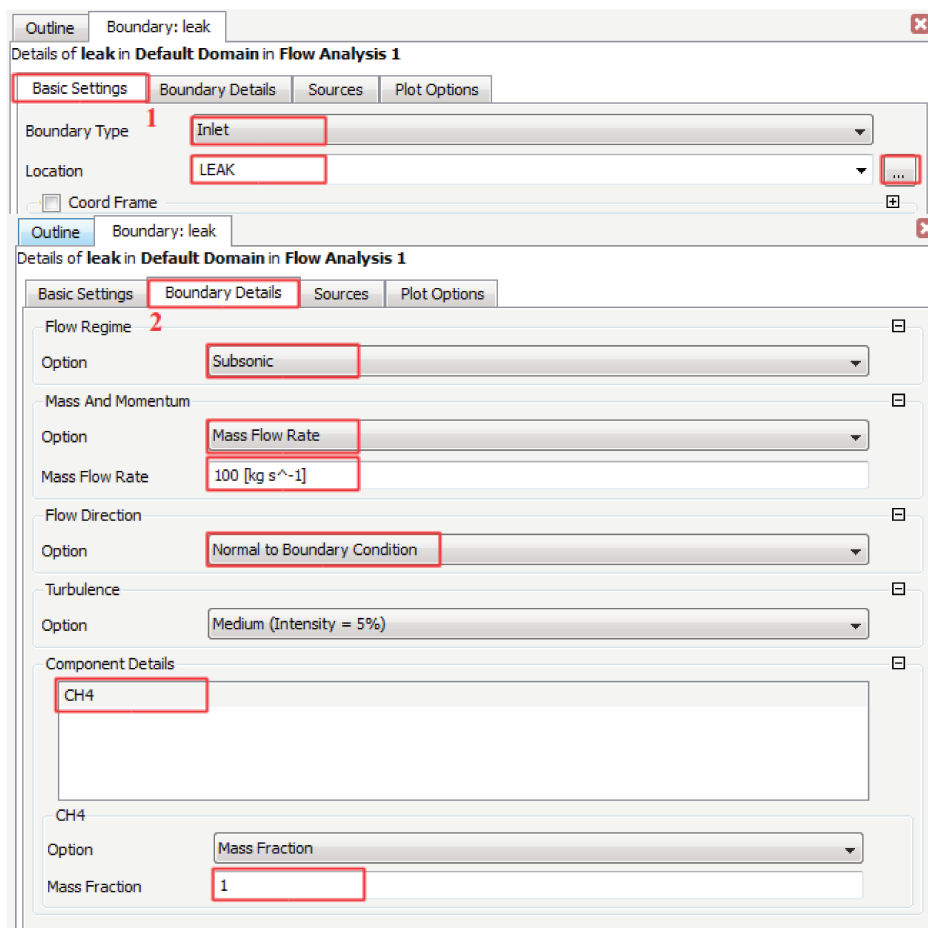


Figura B.18: Demonstração de aplicação da condição para o vazamento de gás.

As saídas foram agrupadas em uma única condição, que foi nomeada como *out*, como pode ser verificado na Figura B.9. A condição de contorno aplicada é do tipo *opening* e o regime é subsônico, de acordo com a Figura B.19. Além disso, deve ser adicionada a expressão criada para resolução das espécies, conforme exemplificado na Figura B.16, a qual deve ser implementada na opção *Component Details*>*Mass Fraction*>*out*, como está demonstrado na Figura B.19 item 2.

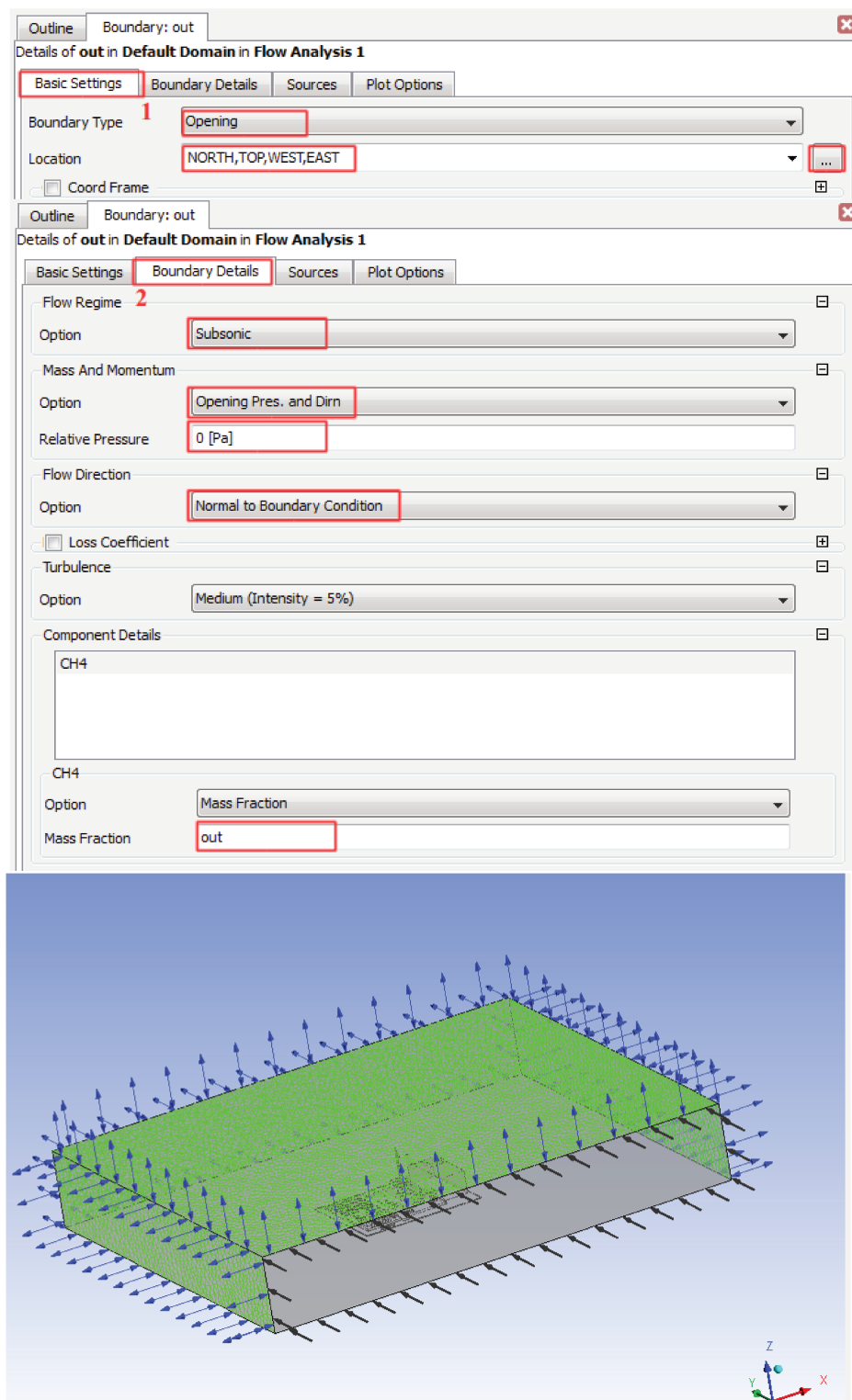


Figura B.19: Demonstração de aplicação da condição para as saídas.

A última condição de contorno a ser determinada é a ventilação, a qual foi nomeada como *wind*, como pode ser verificado na Figura B.9. A condição de contorno aplicada é do tipo *inlet* e o regime é subsônico, de acordo com a Figura B.20. Além disso, deve ser selecionada a velocidade, sendo assim deve-se escolher a opção *Mass and*

Momentum>*Normal Speed* e também selecionar a fração mássica como sendo zero para o metano, como demonstrado na Figura B.20 item 1 e 2.

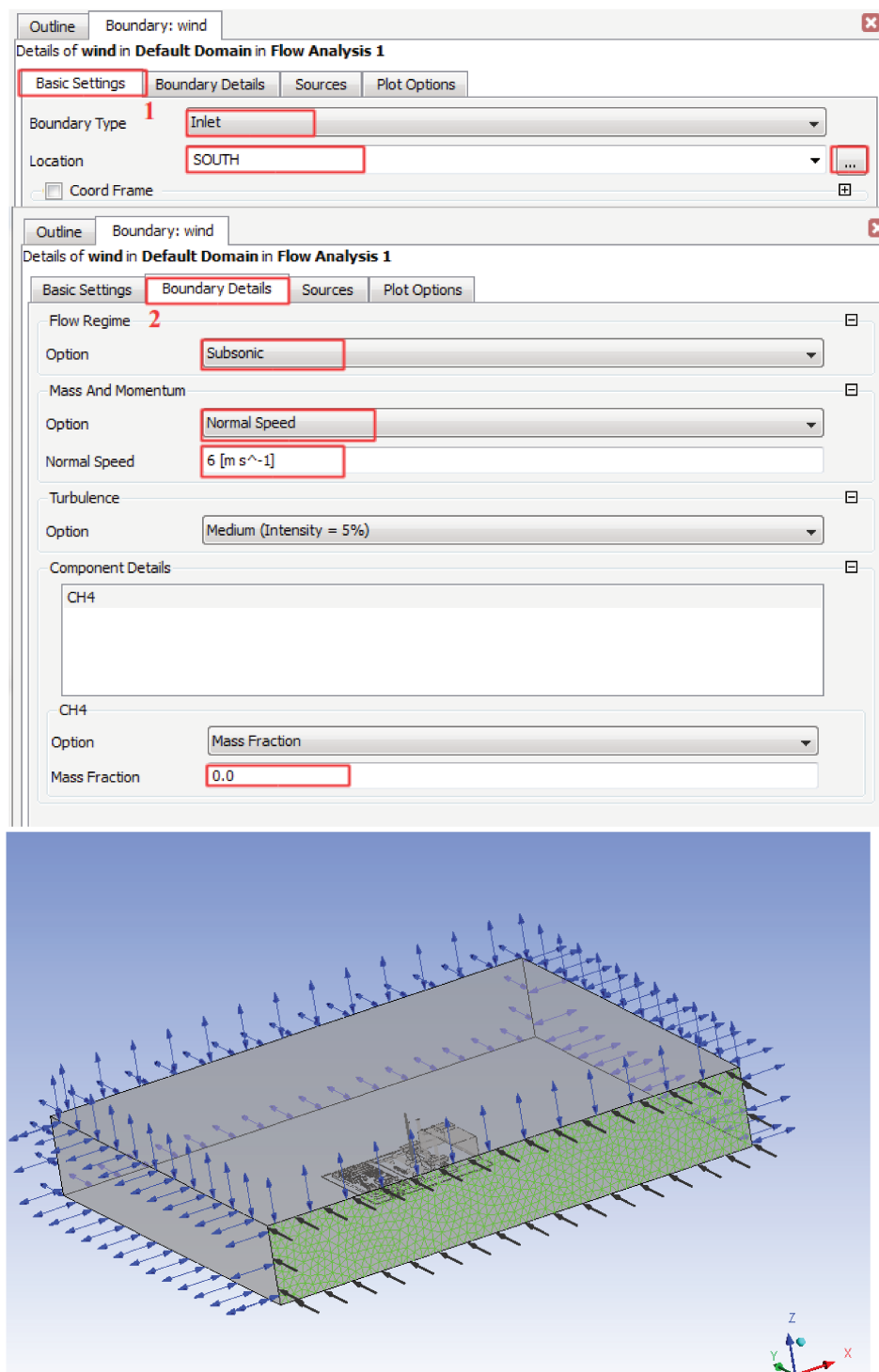


Figura B.20: Demonstração de aplicação da condição para a ventilação.

B.2.5 Esquemas numéricos e geração do executável

No que tange a escolha dos esquemas numéricos, como pode ser verificado na Figura B.21, no item 1 deve ser determinado o esquema advectivo, que neste caso é *Upwind*. A turbulência como sendo de primeira ordem, item 2. O número mínimo e máximo de iterações sendo de 1-1000, conforme item 3 e o resíduo de $1 \cdot 10^{-6}$, como mostra o item 4.

Já para a geração do executável, deve ser selecionado na barra de ferramentas o item 5 da Figura B.21, o que gerará um arquivo `.def`, este será executado pelo *solver*.

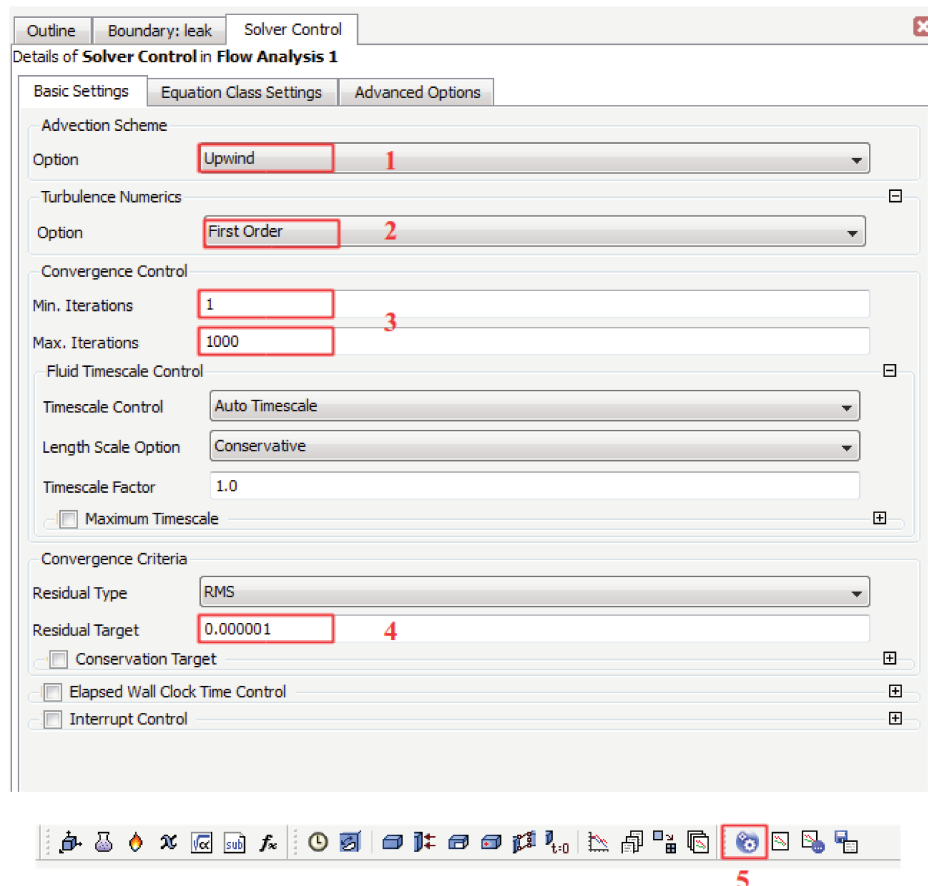


Figura B.21: Demonstração da etapa de escolha dos esquemas numéricos e geração do executável.

B.3 Pós-Processamento - Geração da nuvem

A etapa de geração da nuvem é realizada por meio do pós-processamento do ANSYS-CFX. A primeira etapa é a definição do volume. Assim em *Location>Volume 1>OK*. Depois deve ser definido o tipo de análise, neste caso é o *isoVolume*. Conforme a Figura B.22.

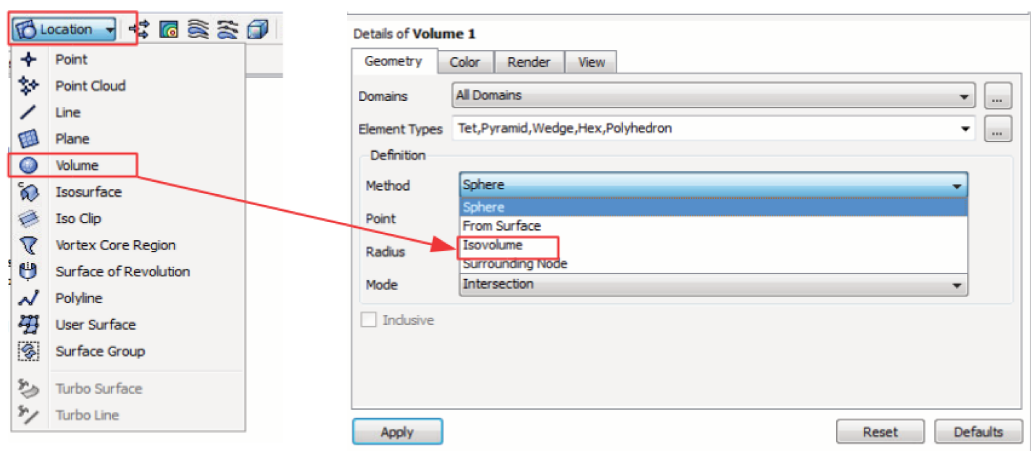


Figura B.22: Geração na nuvem inflamável no ANSYS-CFX.

Logo, deve ser selecionado a variável que será analisada, neste caso a fração molar do metano (item 1). Depois deve ser selecionada a faixa inflamável, em *mode*>*Between Values*, que para o metano é de 0,05 a 0,15, também deve ser marcada a opção *Inclusive* (item 2). Estas instruções estão demonstradas na Figura B.23. Na Figura B.24 é possível verificar a nuvem inflamável.

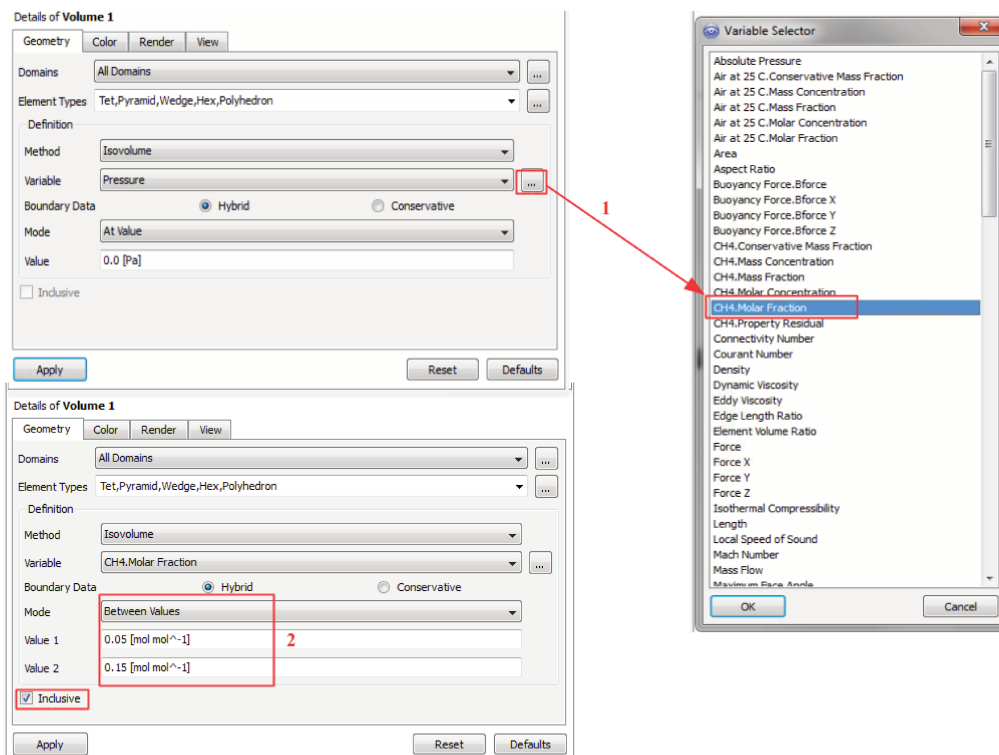


Figura B.23: Geração na nuvem inflamável no ANSYS-CFX.

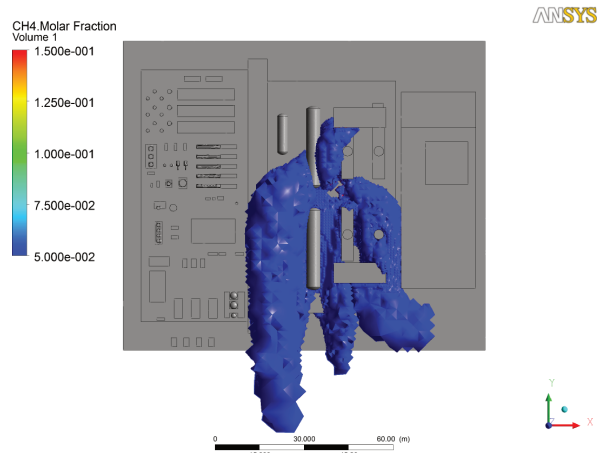


Figura B.24: Nuvem inflamável gerada no ANSYS-CFX.

Para o cálculo do volume, deve entrar na aba *Expresion>Function Calculator* dentro desta utilidade deve ser selecionada a opção *Volume Int*, e também deve ser selecionado o domínio de interesse que neste caso será o isovolume e a variável, para qual será calculado o volume como sendo a fração molar de metano. Conforme descrito na Figura B.25, itens de 1 a 5.

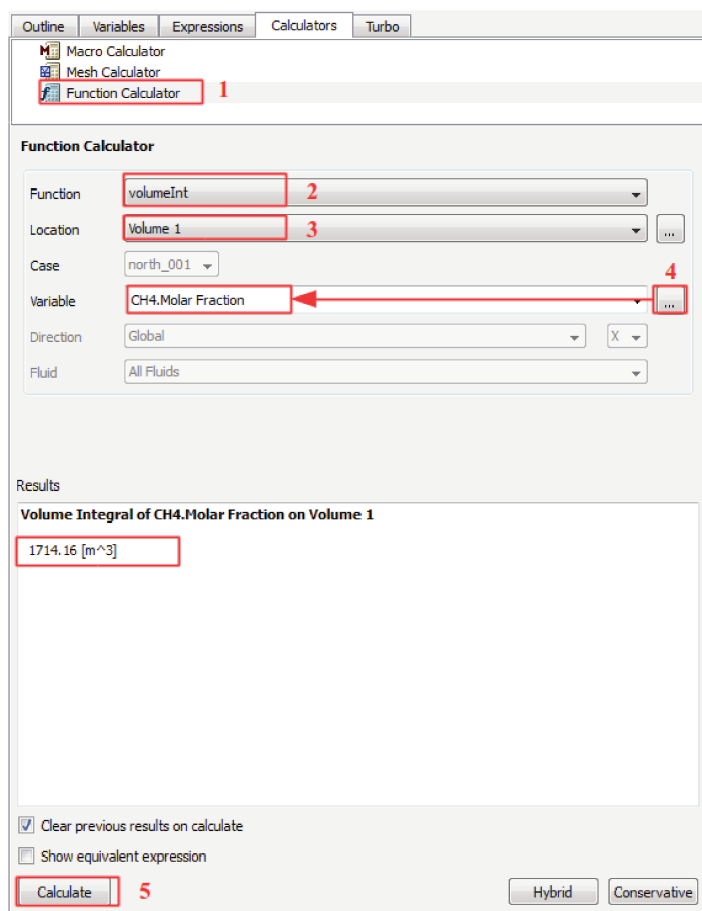


Figura B.25: Cálculo do volume da nuvem inflamável gerada no ANSYS-CFX.