



RENATA PINTO DA SILVA MATOS

**DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO PARA A
ESTIMATIVA DA MÁXIMA SOBREPRESSÃO GERADA
EM UMA EXPLOSÃO DE GÁS**

CAMPINAS

2014



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Faculdade de Engenharia Química

RENATA PINTO DA SILVA MATOS

**DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO PARA A ESTIMATIVA DA
MÁXIMA SOBREPRESSÃO GERADA EM UMA EXPLOSÃO DE GÁS**

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para 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 RENATA PINTO DA SILVA MATOS, E ORIENTADA PELO PROF. DR. SÁVIO SOUZA VENÂNCIO VIANNA

CAMPINAS

2014

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura
Luciana Pietrosanto Milla - CRB 8/8129

M428d Matos, Renata Pinto da Silva, 1987-
Desenvolvimento de um modelo para a estimativa da máxima sobrepressão gerada em uma explosão de gás / Renata Pinto da Silva Matos. – Campinas, SP : [s.n.], 2014.

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

1. Explosão. 2. Fluidodinâmica computacional. 3. Turbulência. 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 a model to evaluate the maximum overpressure generated in a gas explosion

Palavras-chave em inglês:

Explosion

Computational fluid dynamics

Turbulence

Área de concentração: Sistemas de Processos Químicos e Informática

Titulação: Mestra em Engenharia Química

Banca examinadora:

Sávio Souza Venâncio Vianna [Orientador]

Gustavo Paim Valença

Rogério Gonçalves dos Santos

Data de defesa: 03-11-2014

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

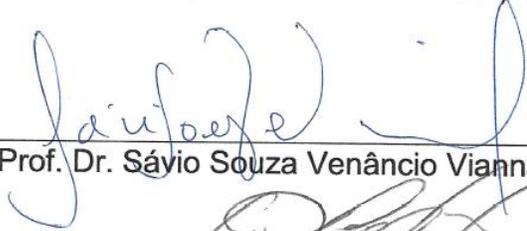
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Desenvolvimento de um modelo para a estimativa da máxima
sobrepessão gerada em uma explosão de gás**

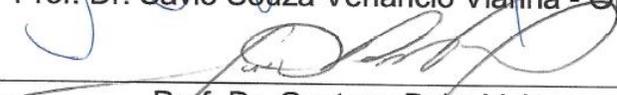
Autora: Renata Pinto da Silva Matos

Orientador: Prof. Dr. Sávio Souza Venâncio Vianna

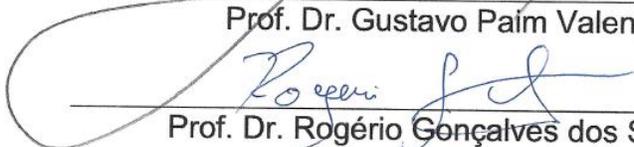
Dissertação de Mestrado defendida por Renata Pinto da Silva Matos e aprovada em 03 de novembro de 2014 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. Sávio Souza Venâncio Vianna - Orientador



Prof. Dr. Gustavo Paim Valença



Prof. Dr. Rogério Gonçalves dos Santos

RESUMO

A máxima sobrepressão de uma explosão de gás é um dos principais parâmetros estimados em uma Análise de Consequências. Muitas vezes é necessário fazer estimativas iniciais do seu valor, principalmente na fase conceitual de projeto. Portanto um modelo para estimativa da máxima sobrepressão gerada em uma explosão de gás que é de fácil implementação e que possui uma abordagem teórica foi desenvolvido. Ele foi implementado no software de planilhas eletrônicas *Microsoft Excel* e apresenta tempo de resposta curto.

O modelo desenvolvido é baseado no conceito *flamelet* como apresentado por BML (Bray, Moss e Libby). Ele considera o efeito de obstáculos na aceleração da chama em uma explosão dentro de uma câmara em larga escala com *vent*. A modelagem da energia cinética turbulenta e da sua taxa de dissipação é baseada em fluidodinâmica computacional (*CFD*). Simulações numéricas foram conduzidas no *FLACS (Flame Acceleration Simulator)*.

O desempenho do modelo foi avaliado em três diferentes conjuntos de dados experimentais de explosões de gás em larga escala dentro de câmaras parcialmente confinadas e obstruídas similares a um módulo *offshore*: os experimentos da *British Gas*, *Shell* e *DNV*. O modelo foi capaz de representar o aumento da área da chama devido à turbulência causada pela presença de obstáculos para os três experimentos em questão. Espera-se que o modelo seja capaz de representar o mesmo comportamento em geometrias similares à da *British Gas* sem o ajuste de constantes.

Comparações com modelos existentes que não são de *CFD* mostraram um desempenho muito promissor e uma boa concordância com dados experimentais foi observada.

ABSTRACT

The maximum overpressure of gas explosion is one of the main parameters estimated in the Consequence Analysis. Quite often it is necessary to make some initial estimative of its value, particularly in the conceptual design phase. Therefore a model to estimate the maximum overpressure of gas explosion that is easy to implement and have a theoretical approach has been developed. It has been implemented in the Microsoft Excel spreadsheet and it presents a short response time.

The developed model is based on the flamelet concept as put forward by BML (Bray, Moss and Libby). It takes into account the effect of obstacles on the flame acceleration in the explosion inside a large scale chamber with vent. The modelling of the turbulent kinetic energy as well as the rate of dissipation of turbulent kinetic energy is based on computational fluid dynamics (CFD). Numerical simulations were conducted in FLACS (Flame Acceleration Simulator).

The performance of the model has been verified for three different sets of experimental data from large scale gas explosions inside partially confined and obstructed chambers which are similar to an offshore module: the experiments from British Gas, Shell and DNV. The model was capable of representing the increase of the flame area due to the turbulent field ahead of the flame caused by the presence of obstacles for the three experiments. It is expected that the model is able to represent the same behaviour in geometries similar to the British Gas without the constant adjustment.

Comparisons with existing non CFD models have shown a very promising performance and good agreement with experimental data was observed.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	xix
LISTA DE TABELAS	xxix
LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS	xxxii
LISTA DE SÍMBOLOS	xxxiii
1 INTRODUÇÃO.....	1
1.1 INDÚSTRIA E SEGURANÇA	1
1.2 EXPLOSÕES	4
1.3 MODELOS PARA EXPLOSÃO	7
1.4 OBJETIVOS.....	8
1.5 ESTRUTURA DO TRABALHO.....	9
2 COMBUSTÃO.....	11
2.1 PRINCIPAIS CONCEITOS.....	11
2.1.1 Estequiometria	11
2.1.2 Limites de inflamabilidade	12
2.1.3 Ignição	12
2.1.4 Combustão pré-misturada e não pré-misturada	13
2.1.5 Regimes de combustão	14
2.2 COMBUSTÃO PRÉ-MISTURADA LAMINAR.....	15
2.2.1 Velocidade de queima laminar da chama	15
2.2.2 A estrutura da chama laminar	18
2.2.3 Espessura da chama laminar	19
2.3 ESCOAMENTOS TURBULENTOS	21

2.3.1	Conceitos	21
2.3.2	Escalas turbulentas.....	24
2.3.3	Modelagem de escoamentos turbulentos	26
2.4	COMBUSTÃO PRÉ-MISTURADA TURBULENTA.....	28
2.4.1	Velocidade de queima turbulenta	29
2.4.2	Números adimensionais	30
2.4.3	O estiramento da chama.....	31
2.4.4	A estrutura da chama turbulenta	32
2.5	EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO DA COMBUSTÃO	33
2.6	MODELAGEM DA COMBUSTÃO PRÉ-MISTURADA TURBULENTA.....	36
3	EXPLOSÃO DE GÁS	37
3.1	CLASSIFICAÇÃO DAS EXPLOSÕES.....	39
3.1.1	Quanto ao modo de propagação.....	39
3.1.2	Quanto ao local em que ocorre	40
3.2	FATORES QUE INFLUENCIAM A DEFLAGRAÇÃO.....	41
3.2.1	Obstruções	41
3.2.2	Confinamento.....	43
3.2.3	Outros fatores.....	43
4	MODELAGEM DA EXPLOSÃO DE GÁS	45
4.1	MODELOS EMPÍRICOS E SEMI-EMPÍRICOS.....	45
4.1.1	Equivalência de TNT, TNO multi-energia e Baker-Strehlow	46
4.1.2	Modelos que consideram a presença do <i>vent</i>	48
4.1.3	Modelos que consideram a presença do <i>vent</i> e a geometria	51

4.2	MODELOS FENOMENOLÓGICOS	53
4.3	MODELOS DE FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL	54
5	METODOLOGIA.....	57
5.1	DESENVOLVIMENTO DO MODELO	57
5.1.1	Modelo para a taxa de descarga	58
5.1.2	Modelo para a taxa de reação química.....	59
5.1.3	O modelo para cálculo da sobrepressão.....	62
5.2	PARÂMETROS DO MODELO	63
5.2.1	Velocidade de queima laminar.....	64
5.2.2	Volume da chama	64
5.2.3	Variável de progresso média.....	66
5.2.4	Velocidade turbulenta <i>rms</i>	66
5.3	AVALIAÇÃO DO MODELO	70
5.3.1	O experimento da <i>British Gas</i>	72
5.3.2	O experimento <i>SOLVEX</i>	74
5.3.3	O experimento da <i>DNV</i>	77
5.3.4	Comparação com outros modelos.....	79
5.4	IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO	80
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	85
6.1	RESULTADOS PARA O EXPERIMENTO DA <i>BRITISH GAS</i>	85
6.1.1	Resultados iniciais	85
6.1.2	O modelo modificado	90
6.1.3	Resultados das simulações no <i>FLACS</i>	91

6.1.4	Resultados do modelo modificado.....	96
6.1.5	Avaliação da resposta do modelo a alterações em variáveis de entrada.....	100
6.1.6	Verificação do regime em que se encontra a chama.....	103
6.2	RESULTADOS PARA O EXPERIMENTO <i>SOLVEX</i>	106
6.2.1	Resultados iniciais	106
6.2.2	Avaliação das incertezas do modelo	109
6.2.3	Verificação do regime em que se encontra a chama.....	115
6.3	RESULTADOS PARA O EXPERIMENTO DA <i>DNV</i>	117
6.3.1	Resultados iniciais	117
6.3.2	Avaliação das incertezas do modelo	119
6.3.3	Verificação do regime em que se encontra a chama.....	124
6.4	COMPARAÇÃO COM MODELOS EXISTENTES	125
7	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	135
7.1	CONCLUSÕES.....	135
7.2	TRABALHOS FUTUROS.....	136
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	139
	APÊNDICE	147
	A. Procedimento para utilização da planilha desenvolvida.....	147

DEDICATÓRIA

À minha mãe, Jane, por todos esses anos de dedicação, amor e incentivo. Sem você nada disso seria possível.

AGRADECIMENTOS

É muito difícil expressar em palavras o que sinto por todos que fizeram parte desta etapa importantíssima da minha vida, mas não poderia deixar de fazê-lo. Seguem os meus agradecimentos:

A Deus, por ter me guiado durante todo este percurso.

Ao meu orientador, professor Dr. Sávio S. V. Vianna, pela orientação e incentivo durante o desenvolvimento deste trabalho.

À *DNV GL*, pela parceria que foi de fundamental importância para o desenvolvimento deste trabalho, em especial ao engenheiro Pedro J. G. de Araújo, pela sua colaboração.

Aos professores e funcionários da Universidade Estadual de Campinas com os quais tive a oportunidade de conviver, em especial aos da Faculdade de Engenharia Química, por terem compartilhado conhecimento e experiências que foram de fundamental importância para o meu desenvolvimento profissional e pessoal.

À CAPES, pelo apoio financeiro.

À minha família, em especial à minha mãe Jane e à minha prima Rejane, que sempre me apoiaram. Sem vocês eu não poderia ter chegado até aqui.

Ao Francisco, por todo incentivo e paciência.

Aos meus amigos, em especial à Raquel e ao Caio, pelo apoio e pela amizade.

Aos meus colegas de laboratório, pela convivência.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1: Esquema apresentando as etapas de uma Análise de Consequências (Adaptado de: CCPS, 2000).....	3
Figura 1.2: Fotos do danos provocados pela explosão no interior (A) e no exterior (B) do depósito (Fonte: JOHNSON, 2010).	5
Figura 1.3: Fotos do danos causados pela explosão em um prédio (A) e no estacionamento (B) do depósito (Fonte: SHARMA <i>et al.</i> , 2013).....	5
Figura 1.4: Fotos do interior (A) e exterior (B) da fábrica da ConAgra após a explosão (Fonte: CSB, 2010).	6
Figura 1.5: Fotos da plataforma P-36 da Petrobras após o acidente, primeiramente tombou (A) e depois afundou (B) (Fonte: (A) EXAME, 2014; (B) FOLHA ONLINE, 2014).....	7
Figura 2.1: Esquema de uma chama da combustão laminar pré-misturada (A) e não pré-misturada (B).	14
Figura 2.2: Esquema representado a velocidade da chama (S) e a velocidade dos reagentes (S_{ug}) para um observador estacionário no caso de uma combustão pré-misturada dentro de um tubo. A velocidade de queima (S_b) é a diferença entre os vetores S e S_{ug}	16
Figura 2.3: Gráfico da velocidade de queima laminar em função da razão de equivalência a 1 atm e 298 K (Adaptado de: YAN <i>et al.</i> , 2011).....	17
Figura 2.4: Gráfico qualitativo da estrutura da chama dividida em três zonas (Adaptado de: CANT e MASTORAKOS, 2008).....	18
Figura 2.5: Espessura da chama em função da razão de equivalência para a mistura metano e ar (Adaptado de: TURNS, 2000).....	20
Figura 2.6: Medida da velocidade na direção x em um ponto em função do tempo para um escoamento turbulento (Fonte: TURNS, 2000).....	22
Figura 2.7: Diagrama de Borghi modificado e os possíveis regimes da chama pré-misturada turbulenta (Adaptado de: CANT e MASTORAKOS, 2008).....	33
Figura 3.1: Gráfico de pressão num dado ponto ao longo do tempo descrevendo possíveis tipos de <i>blast waves</i> em uma explosão,: (A) <i>shock wave</i> seguida de <i>rarefaction wave</i> , (B) <i>shock wave</i>	

seguida de <i>sonic compression wave</i> e <i>rarefaction wave</i> e (C) <i>sonic compression wave</i> seguida de <i>rarefaction wave</i> (Adaptado de Bjerketvedt <i>et al.</i> , 1997).	38
Figura 3.2: Esquema representando o mecanismo <i>feedback</i> positivo de aceleração da chama devido à presença de obstáculos (Adaptado de: BJERKETVEDT <i>et al.</i> , 1997).	42
Figura 5.1: Esquema 3D da câmara do experimento da <i>British Gas</i> , com o <i>vent</i> representado pela área em preto e as obstruções representadas pelos tubos cilíndricos em preto (Fonte: ARNTZEN, 1998).	58
Figura 5.2: Representação gráfica do conceito da abordagem <i>flamelet crossing frequency</i> (Adaptado de: CANT e MASTORAKOS, 2008).	60
Figura 5.3: Representação da onda quadrada obtida na abordagem <i>flamelet crossing frequency</i> (Fonte: CANT e MASTORAKOS, 2008).	61
Figura 5.4: Esquema representando a câmara em que ocorre a explosão, destaque para a região delimitada pelos planos em vermelho que corresponde à região ocupada pela chama planar. A espessura da chama (δ) foi representada fora de escala com o intuito de facilitar a sua visualização.	65
Figura 5.5: Esquema da alocação de tubos para o arranjo de vinte tubos com <i>NC</i> igual a 4 e <i>NT</i> igual a 5, vista lateral da câmara.	68
Figura 5.6: Esquema com as principais dimensões da câmara do experimento da <i>British Gas</i> . A área hachurada representa o <i>vent</i> , e o ponto na parede oposta ao <i>vent</i> representa o ponto de ignição.	72
Figura 5.7: Esquema 3D representando a localização espacial das obstruções na câmara do experimento da <i>British Gas</i> para os arranjos de 20 (A) e 40 (B) tubos (Fonte: ARNTZEN, 1998).	73
Figura 5.8: Esquema com as principais dimensões da câmara do experimento <i>SOLVEX</i> . A área hachurada representa o <i>vent</i> , e o ponto na parede oposta ao <i>vent</i> representa o ponto de ignição.	75
Figura 5.9: Esquema da geometria do experimento <i>SOLVEX</i> para o caso com 14 tubos (Fonte: Vianna, 2009).	75
Figura 5.10: Esquema com as principais dimensões da câmara do experimento da <i>DNV</i> . A área hachurada representa o <i>vent</i> , e o ponto na parede oposta ao <i>vent</i> representa o ponto de ignição.	77

Figura 5.11: Esquema da geometria do experimento da <i>DNV</i> para o caso com 4 colunas de tubos (Fonte: Vianna, 2009).....	78
Figura 5.12: <i>Screenshot</i> do código em <i>VBA</i> da menor <i>Macro</i> que automatiza o uso da ferramenta <i>Solver</i>	82
Figura 5.13: <i>Screenshot</i> do código em <i>VBA</i> da menor <i>Macro</i> que faz com que os valores de P_0 inicial retornem ao valor inicial.....	82
Figura 5.14: <i>Layout</i> de uma das abas da planilha que foi desenvolvida.....	83
Figura 6.1: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da intensidade turbulenta relativa (u'_{rms}/u_L), resultados obtidos para C_L igual a 0,05, 0,04 e 0,03.....	86
Figura 6.2: Gráficos da função empírica $f(u'_{rms}/u_L)$ de Abu-orf e Cant (2000), para u'_{rms}/u_L indo de 0 a 30 (A) e, com o intuito de facilitar a visualização do ponto de mínimo, para u'_{rms}/u_L indo de 0 a 3 (B).	87
Figura 6.3: Gráficos da função empírica de Abu-orf e Cant (2000), para diferentes valores da constante C_{w2} (2, 4, 6 e 8) mantendo o valor de C_{w1} original (1,5), para u'_{rms}/u_L indo de 0 a 30 (A) e de 0 a 3 (B).....	87
Figura 6.4: Gráficos da função empírica de Abu-orf e Cant (2000), para diferentes valores da constante C_{w1} (0,75, 1,5, 2,25 e 3) mantendo o valor de C_{w2} original (4), para u'_{rms}/u_L indo de 0 a 30 (A) e de 0 a 3 (B).	88
Figura 6.5: Gráfico da função empírica de Abu-orf e Cant (2000) para quatro diferentes conjuntos de valores das constantes C_{w1} e C_{w2} (1,5 e 4, 4,5 e 2, 9 e 0,2, 16,5 e 0,04).	89
Figura 6.6: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os valores obtidos com as simulações no <i>FLACS</i> e os dados experimentais da <i>British Gas</i>	91
Figura 6.7: Gráfico de comparação entre os resultados do <i>FLACS</i> e os do experimento da <i>British Gas</i> em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}), onde as retas tracejadas representam desvio igual a + 15% e - 5% e a reta contínua representa desvio igual a zero.	92
Figura 6.8: Resultados em termos de fração mássica de combustível e vetor velocidade obtidos das simulações do <i>FLACS</i> para o arranjo de número 2 nos tempos: 0 s (A), 0,457 s (B) e 0,517 s (C).....	93

Figura 6.9: Gráfico da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta máxima (ϵ) em função da razão de bloqueio de volume (VBR) para os 13 casos simulados no <i>FLACS</i> , juntamente com a curva da regressão polinomial.....	95
Figura 6.10: Gráfico da energia cinética turbulenta máxima (k) em função da razão de bloqueio de volume (VBR) para os 13 casos simulados no <i>FLACS</i> , juntamente com a curva da regressão polinomial.....	95
Figura 6.11: Gráficos da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR): comparação dos resultados obtidos com o modelo utilizando a correlação para estimar ϵ com os dados experimentais da <i>British Gas</i> (A) e comparação dos resultados obtidos com o modelo utilizando os valores de ϵ do <i>FLACS</i> com os dados experimentais da <i>British Gas</i> (B).	96
Figura 6.12: Gráficos de comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os dados do experimento da <i>British Gas</i> em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}), resultados obtidos utilizando a correlação de ϵ no modelo (A), e utilizando os valores de ϵ das simulações no modelo (B). As retas tracejadas representam desvio igual a + 65% e - 65% e as retas contínuas representam desvio igual a zero.....	97
Figura 6.13: Gráfico da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta máxima (ϵ) em função da razão de bloqueio de volume (VBR) para os 13 casos simulados no <i>FLACS</i> , dados separados de acordo com o número de colunas do arranjo (NC).	99
Figura 6.14: Gráfico da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta máxima (ϵ) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), juntamente com a curva da regressão polinomial. Os valores de ϵ desse gráfico são os que tornam nulo o desvio entre os resultados do modelo e os do experimento da <i>British Gas</i> em termos de sobrepressão máxima.....	101
Figura 6.15: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR) para diferentes graus de preenchimento da câmara (V_C/V). A curva com V_C/V igual a 100% representa o experimento da <i>British Gas</i>	101
Figura 6.16: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR) para diferentes valores de área transversal ocupada pelo vent (A_V/A_W). A curva com A_V/A_W igual a 11% representa o experimento da <i>British Gas</i>	102

Figura 6.17: Resultados obtidos dispostos no Diagrama de Borghi modificado para Da , Ka , e Re_t estimados utilizando as correlações de ε e k .	104
Figura 6.18: Resultados obtidos dispostos no Diagrama de Borghi modificado para Da , Ka e Re_t estimados empregando os valores de ε e k das simulações do <i>FLACS</i> .	104
Figura 6.19: Resultados obtidos dispostos no Diagrama de Borghi modificado para Da , Ka e Re_t estimados utilizando as correlações de ε ideal e k .	105
Figura 6.20: Gráficos da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo e os dados do experimento <i>SOLVEX</i> para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e para a mistura ar e propano estequiométrica (B).	107
Figura 6.21: Gráficos de comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os dados do experimento <i>SOLVEX</i> em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}) para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e para a mistura propano e ar estequiométrica (B). As retas tracejadas representam desvio igual a + 75% e - 75% ou + 85% e - 85% e a retas contínuas representam desvio igual a zero.	107
Figura 6.22: Gráficos da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando quatro valores diferentes da constante g e os dados do experimento <i>SOLVEX</i> para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e para a mistura ar e propano estequiométrica (B). As curvas $C= 2$ representam os resultados para o valor de g adotado para o modelo proposto.	110
Figura 6.23: Gráficos da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando quatro valores diferentes da constante σ_y e os dados do experimento <i>SOLVEX</i> para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e para a mistura ar e propano estequiométrica (B). As curvas $C= 0,5$ representam os resultados para o valor de σ_y adotado para o modelo proposto.	110
Figura 6.24: Gráficos da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando os valores da constante σ_y que proporcionaram os melhores ajustes aos dados do experimento <i>SOLVEX</i> para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e para a mistura ar e propano estequiométrica (B).	111

Figura 6.25: Gráficos de comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os dados do experimento <i>SOLVEX</i> em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}), resultados obtidos para σ_y igual a 0,5 e 0,295 para a mistura metano e ar estequiométrica (A) e resultados obtidos para σ_y igual a 0,5 e 0,265 para a mistura propano e ar estequiométrica (B). As retas tracejadas representam desvio igual a + 10% e - 30% ou + 10% e -50%, e as retas contínuas representam desvio igual a zero.	112
Figura 6.26: Gráficos da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (<i>VBR</i>), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando quatro valores diferentes de δ e os dados do experimento <i>SOLVEX</i> para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e para a mistura ar e propano estequiométrica (B). As curvas $C= 1$ mm representam os resultados para o valor de δ adotado para o modelo proposto.	113
Figura 6.27: Gráficos da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (<i>VBR</i>), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando os valores de espessura da chama que proporcionaram os melhores ajustes aos dados do experimento <i>SOLVEX</i> para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e para a mistura ar e propano estequiométrica (B).	114
Figura 6.28: Gráficos de comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os dados do experimento <i>SOLVEX</i> em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}), resultados obtidos para δ igual a 1 e 1,7 mm para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e resultados obtidos para δ igual a 1 e 1,9 mm para a mistura ar e propano estequiométrica (B). As retas tracejadas representam desvio igual a + 10% e - 30% ou a + 10% e - 50%, e as retas contínuas representam desvio igual a zero.	114
Figura 6.29: Resultados obtidos dispostos no Diagrama de Borghi modificado para a mistura ar e metano estequiométrica.	115
Figura 6.30: Resultados obtidos dispostos no Diagrama de Borghi modificado para a mistura ar e propano estequiométrica.	116
Figura 6.31: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (<i>VBR</i>), comparação entre os resultados obtidos com o modelo e os dados do experimento da <i>DNV</i>	117

Figura 6.32: Gráfico de comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os dados do experimento da <i>DNV</i> em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}). As retas tracejadas representam desvio igual a + 80% ou - 80% e a reta contínua representa desvio igual a zero. ...	118
Figura 6.33: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (<i>VBR</i>), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando quatro valores diferentes da constante g e os dados do experimento da <i>DNV</i> . A curva $C= 2$ representa os resultados para o valor de g adotado para o modelo proposto.....	119
Figura 6.34: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (<i>VBR</i>), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando quatro valores diferentes da constante σ_y e os dados do experimento da <i>DNV</i> . A curva $C= 0,5$ representa os resultados para o valor de σ_y adotado para o modelo proposto.	120
Figura 6.35: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (<i>VBR</i>), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando o valor da constante σ_y que proporcionou o melhor ajuste aos dados do experimento da <i>DNV</i>	121
Figura 6.36: Gráfico de comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os dados do experimento da <i>DNV</i> em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}), resultados obtidos para σ_y igual a 0,5 e 0,108. As retas tracejadas representam desvio igual a + 120% e - 35%, e a reta contínua representa desvio igual a zero.	121
Figura 6.37: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (<i>VBR</i>), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando quatro valores diferentes de δ e os dados do experimento da <i>DNV</i> . A curva $C= 1$ mm representa os resultados para o valor de δ adotado para o modelo proposto.	122
Figura 6.38: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (<i>VBR</i>), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando o valor da espessura da chama (δ) que proporcionou o melhor ajuste aos dados do experimento da <i>DNV</i> . 123	
Figura 6.39: Gráfico de comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os dados do experimento da <i>DNV</i> em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}), resultados obtidos para δ igual a 1 e 4,65 mm. As retas tracejadas representam desvio igual a + 120% e - 35%, e a reta contínua representa desvio igual a zero.	123
Figura 6.40: Resultados obtidos dispostos no Diagrama de Borghi modificado.	124

Figura 6.41: Comparação entre os resultados obtidos com os modelos existentes e com o modelo desenvolvido em termos de sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) para o caso da câmara vazia do experimento da <i>British Gas</i>	125
Figura 6.42: Comparação entre os resultados obtidos com os modelos existentes e com o modelo desenvolvido em termos de sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) para o caso da câmara vazia e mistura ar e metano estequiométrica do experimento <i>SOLVEX</i>	126
Figura 6.43: Comparação entre os resultados obtidos com os modelos existentes e com o modelo desenvolvido em termos de sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) para o caso da câmara vazia e mistura ar e propano estequiométrica do experimento <i>SOLVEX</i>	126
Figura 6.44: Comparação entre os resultados obtidos com os modelos existentes e com o modelo desenvolvido em termos de sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) para o caso da câmara vazia do experimento da <i>DNV</i>	127
Figura 6.45: Comparação entre os resultados obtidos com o modelo de Fakandu, o modelo desenvolvido e o modelo desenvolvido ajustado, em termos de sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) para o caso da câmara vazia e mistura ar e metano estequiométrica do experimento <i>SOLVEX</i>	128
Figura 6.46: Comparação entre os resultados obtidos com o modelo de Yao, o modelo desenvolvido e o modelo desenvolvido ajustado, em termos de sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) para o caso da câmara vazia e mistura ar e propano estequiométrica do experimento <i>SOLVEX</i>	128
Figura 6.47: Comparação entre os resultados obtidos com o modelo de Yao, o modelo desenvolvido e o modelo desenvolvido ajustado, em termos de sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) para o caso da câmara vazia do experimento da <i>DNV</i>	129
Figura 6.48: Gráfico log-log de comparação entre os resultados obtidos com os modelos e os dados dos experimentos da <i>British Gas</i> , <i>Shell</i> e <i>DNV</i> em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}) para a câmara vazia. As retas tracejadas representam desvio igual a + 50% e - 50% e a reta contínua representa desvio igual a zero.	130
Figura 6.49: Gráfico da máxima sobrepressão da explosão (P_{red}) em função da distância para o modelo TNT aplicado aos experimentos: <i>British Gas</i> , <i>SOLVEX</i> metano, <i>SOLVEX</i> propano e <i>DNV</i>	131

Figura 6.50: Gráfico da máxima sobrepressão da explosão (P_{red}) em função da distância para o modelo TNO multi-energia aplicado aos experimentos: <i>British Gas</i> , <i>SOLVEX</i> metano, <i>SOLVEX</i> propano e <i>DNV</i>	132
Figura A.1: <i>Layout</i> do Menu da planilha desenvolvida.	147
Figura A.2: <i>Layout</i> da aba “Modelo com correlação de ε ” da categoria “Resultados para o experimento da <i>British Gas</i> ”.	148
Figura A.3: Dados de entrada referentes à geometria do problema.	149
Figura A.4: Dados de entrada referentes à mistura ar e combustível.....	150
Figura A.5: <i>Layout</i> da aba “Propriedades das misturas ar e combustível” da categoria “Outros”.	150
Figura A.6: Dados de entrada referentes às constantes da modelagem BML.....	151
Figura A.7: Dados de entrada referentes às constantes do modelo.....	151
Figura A.8: Parâmetros calculados que não dependem do grau de obstrução da câmara.	152
Figura A.9: Parâmetros que dependem do grau de obstrução da câmara.	153

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1: Estimativas de danos causados em estruturas de acordo com a sobrepressão gerada pela explosão (Adaptado de: CCPS, 2000).	38
Tabela 5.1: Valores das constantes do modelo proposto e respectivas referências.....	63
Tabela 5.2: Valores das constantes da equação para o cálculo da velocidade de queima laminar de Abu-orf (1996) <i>apud</i> Vianna (2009).	64
Tabela 5.3: Valores de NC e NT adotados e valores calculados de N_t , VBR , EH , EV e EV' , de acordo com o número do arranjo. Arranjos de número 1, 3 e 11 representam os três do experimento da <i>British Gas</i>	69
Tabela 5.4: Resultados experimentais obtidos pela <i>British Gas</i> (Fonte: ARNTZEN, 1998).....	73
Tabela 5.5: Dados de entrada do modelo estimados para mistura ar e gás natural estequiométrica do experimento da <i>British Gas</i>	73
Tabela 5.6: Dados de entrada do modelo proposto específicos para o experimento da <i>British Gas</i>	74
Tabela 5.7: Resultados experimentais obtidos pela <i>Shell</i> (Fonte: ARNTZEN, 1998).	76
Tabela 5.8: Dados de entrada do modelo estimados para mistura ar e metano e ar e propano estequiométricas do experimento <i>SOLVEX</i>	76
Tabela 5.9: Dados de entrada do modelo proposto específicos para o experimento <i>SOLVEX</i>	77
Tabela 5.10: Resultados experimentais obtidos pela <i>DNV</i> (Fonte: CATES e SAMUELS, 1991).	78
Tabela 5.11: Dados de entrada do modelo proposto específicos para o experimento da <i>DNV</i>	79
Tabela 5.12: Dados de entrada do modelo estimados para mistura ar e propano ($\Phi = 1,3$) do experimento da <i>DNV</i>	79
Tabela 5.13: Dados de entrada específicos para os modelos que foram utilizados na etapa de comparação.	80

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AC - Análise de Consequências

AQRPQ - Análise Quantitativa de Riscos de Processos Químicos

BML - Bray, Moss e Libby

CFD - Computational Fluid Dynamics

CLICHE - Confined Linked Chamber Explosion

DNS - Direct Numerical Simulation

DNV GL - Det Norske Veritas Germanischer Lloyd

FLACS - Flame Acceleration Simulator

GRG - Gradação Reduzida Generalizada

IChemE - Institution of Chemical Engineers

LES - Large Eddy Simulation

LII - Limite inferior de inflamabilidade

LSI - Limite superior de inflamabilidade

RANS - Reynolds Averaged Navier-Stokes

SCOPE - Shell Code for Overpressure Prediction in gas Explosions

SOLVEX - Shell Offshore Large Vented Explosion

VBA - Visual Basic for Applications

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos romanos

a_{AO} - Constante que depende do tipo de combustível

a_{PLG} - Constante ajustável do modelo de Park, Lee e Green

A - Área da secção transversal

\bar{A} - Parâmetro adimensional que relaciona a área do *vent* e a área superficial

A_S - Área superficial interna do local em que ocorre a explosão

A_T - Área superficial da chama enrugada

A_V - Área do *vent*

A_W - Área da parede em que se encontra o *vent*

A_x - Área transversal da câmara

(A/F) - Razão ar-combustível

$(A/F)_{stoic}$ - Razão estequiométrica ar-combustível

b_{AO} - Constante que depende do tipo de combustível

b_{PLG} - Constante ajustável do modelo de Park, Lee e Green

c - variável de progresso

c_{AO} - Constante que depende do tipo de combustível

c_{PLG} - Constante ajustável do modelo de Park, Lee e Green

c - Variável de progresso

\bar{c} - Variável de progresso média

C - Velocidade local do som

C_d - Coeficiente de descarga

C_D - Fator de formato do obstáculo

C_L - Constante do modelo *flamelet*

C_p - Calor específico à pressão constante

C_{PLG} - Função da geometria do problema do modelo de Park, Lee e Green

C_V - Calor específico à volume constante

C_{w1} - Constante da função empírica $f(u'_{rms}/u_L)$

C_{w2} - Constante da função empírica $f(u'_{rms}/u_L)$
 C_{NFPA} - Constante da correlação da NFPA
 d_{AO} - Constante que depende do tipo de combustível
 d_{PLG} - Constante ajustável do modelo de Park, Lee e Green
 D - Largura da câmara do modelo de Park, Lee e Green
 D_k - Difusividade da espécie química k
 D_o - Tamanho do obstáculo
 Da - Número de Damköhler
 E - Razão de expansão
 E_C - Calor de combustão do gás inflamável
 E_{ind} - Energia de combustão para cada área da planta
 E_{TNT} - Calor de combustão do TNT
 EH - Espaçamento horizontal entre tubos e entre tubo e parede
 EV - Espaçamento vertical entre tubos
 EV' - Espaçamento vertical entre tubo e parede
 $f(u'_{rms}/u_L)$ - Função empírica do modelo *flamelet*
 f_V - Função que depende do tipo de escoamento
 F_i - Forças de campo
 g - Constante do modelo *flamelet*
 h - Entalpia da mistura por unidade de massa
 h_k - Entalpia específica da espécie k
 H - Altura da câmara
 I_0 - Fator de correção de estiramento médio
 k - Energia cinética turbulenta
 Ka - Número de Karlovitz
 l - Escala de comprimento da turbulência
 l_0 - Escala de comprimento dos turbilhões maiores
 \mathcal{L} - Escala de comprimento do escoamento
 L - Comprimento da câmara

L_f - Comprimento do percurso da chama
 L_L - Escala de comprimento laminar
 \hat{L}_y - Escala de comprimento integral do enrugamento
 Le - Número de Lewis
 $(m_{air})_{stoic}$ - Quantidade estequiométrica de ar em massa
 $(m_{fuel})_{stoic}$ - Quantidade estequiométrica de combustível em massa
 Ma - Número de Mach
 n - número de pontos utilizados na obtenção da curva da regressão
 NC - Número de colunas
 NT - Número de tubos por coluna do arranjo
 N_t - Número de tubos total do arranjo
 p - Pressão
 P - Pressão dos reagentes
 P_0 - Pressão absoluta gerada pela explosão
 $P_{0\text{ inicial}}$ - Estimativa inicial da pressão da explosão
 $P_{0\text{ calc}}$ - Pressão da explosão calculada pela ferramenta Solver do Excel
 P_a - Pressão atmosférica
 P_{red} - Sobrepressão da explosão de gás ou máxima sobrepressão da explosão de gás calculada
 $P_{red\text{ exp}}$ - Máxima sobrepressão da explosão experimental
 P_{ref} - Pressão de referência
 Pr - Número de Prandtl
 \dot{q}_L - Taxa de perda de calor para o ambiente
 \dot{q}_R - Taxa de calor gerado pelas reações químicas
 R - Taxa média de reação por unidade de área superficial da chama
 R^2 - Coeficiente de determinação
 Re - Número de Reynolds do escoamento
 Re_t - Número de Reynolds turbulento
 S - Velocidade da chama
 \bar{S}_o - Parâmetro adimensional que relaciona a velocidade do gás não queimado e a do som

S_b - Velocidade de queima
 $\overline{S_F}$ - Velocidade média da chama
 S_{rad} - Termo fonte que representa a variação de entalpia devido à radiação
 S_{ug} - Velocidade dos reagentes (gases não queimados)
 S_ϕ - Termo fonte
 Sc - Número de Schmidt
 t - Tempo
 T_R - Temperatura dos reagentes
 T_{ref} - Temperatura de referência
 u - Velocidade característica da turbulência
 u_0 - Velocidade característica dos turbilhões maiores
 u_i - Velocidade na direção i
 u_L - Velocidade de queima laminar
 $\overline{u_L}$ - Velocidade média efetiva de queima laminar
 u_T - Velocidade de queima turbulenta
 u_η - Escala de velocidade de Kolmogorov
 $\overline{u_i'^2}$ - Variância da flutuação da velocidade
 u'_{rms} - Intensidade turbulenta *rms* ou velocidade turbulenta *rms*
 U - Velocidade característica do escoamento
 V - Velocidade do escoamento ou volume da câmara em que ocorre a explosão
 V_C - Volume da nuvem inflamável
 V_f - Volume da chama
 V_{ind} - Volumes individuais de áreas da planta que contribuem para a geração de altas sobrepressões
 VBR - Razão de bloqueio de volume
 W - Largura da câmara
 W_{HC} - Massa de hidrocarboneto na nuvem
 W_{TNT} - Massa de TNT equivalente
 $y_{i\ curva}$ - valor da variável dependente calculado utilizando a equação da curva da regressão

$y_i \text{ dados}$ - valor da variável dependente utilizado na obtenção da curva da regressão

Y_F - Fração mássica de combustível

Y_{FP} - Fração mássica de combustível nos produtos

Y_{FR} - Fração mássica de combustível nos reagentes

Y_k - Fração mássica da espécie k

Y_O - Fração mássica de oxidante

Y_P - Fração mássica de produtos

Símbolos gregos

α_{AO} - Constante que depende do tipo de combustível

β_{AO} - Constante que depende do tipo de combustível

β - Fator de turbulência

γ - Razão do calor específico

Γ_t - Difusividade turbulenta

Γ_ϕ - Coeficiente de difusão

δ_{ij} - Delta de Kronecker

δ_L - Espessura da chama laminar

Δ_a - Fator de correção da área da chama

ε - Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta

ε_F - Fator de expansibilidade

η - Escala de comprimento de Kolmogorov

η_c - Valor crítico que determina o tipo de escoamento

η_{TNT} - Fator empírico de eficiência da explosão do modelo TNT

λ - Condutividade térmica

μ - Viscosidade dinâmica

μ_t - Viscosidade turbulenta

ν - Viscosidade cinemática

ρ - Densidade

ρ_R - Densidade dos reagentes

$\overline{\rho}_R$ - Densidade média dos reagentes
 σ_t - Número turbulento de Prandtl/Schmidt
 $|\widehat{\sigma}_y|$ - Fator de orientação
 Σ - Razão área superficial da chama por unidade de volume
 τ - Escala de tempo da turbulência
 τ_0 - Escala de tempo dos turbilhões maiores
 τ_{ij} - Tensor de tensões viscosas
 τ_C - Escala de tempo químico
 τ_η - Escala de tempo de Kolmogorov
 φ - Propriedade escalar do escoamento
 ϕ - Propriedade do escoamento
 $\bar{\phi}$ - Média da propriedade ϕ
 $\tilde{\phi}$ - Média Frave da propriedade ϕ
 ϕ' - Componente flutuante da propriedade ϕ
 ϕ'' - Componente flutuante da propriedade ϕ para média Frave
 $\overline{\phi'^2}$ - Variância da propriedade ϕ
 ϕ'_{rms} - Valor quadrático médio da propriedade ϕ
 Φ - Razão de equivalência
 χ - Fator de correção do estiramento da chama
 ψ_0 - Termo que depende do tipo de escoamento
 $\dot{\omega}_k$ - Taxa de reação da espécie k em massa por unidade de volume
 $\bar{\omega}$ - Taxa média de reação
 $\overline{\dot{\omega}_k}$ - Taxa média de reação química da espécie k

1 INTRODUÇÃO

1.1 INDÚSTRIA E SEGURANÇA

Uma indústria de processos químicos está sujeita a ocorrência de incidentes. De acordo com *Center for Chemical Process Safety* (CCPS, 2000) um incidente pode ser definido como a perda de contenção de material ou energia. Uma fratura em um tanque causando a liberação de seu conteúdo (falha mecânica) ou uma válvula indevidamente deixada aberta (erro operacional) são exemplos de possíveis incidentes em indústrias. Um incidente pode ter uma série de resultados e pode vir a se tornar um acidente. Este último é definido como uma sequência de eventos que produz lesão não intencional, morte ou dano material (CROWL e LOUVAR, 2009).

Um vazamento de um gás inflamável e tóxico de uma tubulação (incidente) pode ter como resultado um jato de fogo (*jet fire*), se a ignição for imediata, uma explosão de nuvem de vapor (*vapor cloud explosion*) ou um incêndio de nuvem de vapor (*vapor cloud fire*), se a ignição for adiada, ou ainda uma nuvem tóxica (*toxic cloud*), se não houver ignição (CCPS, 2000). Quando um desses resultados gera lesão, morte ou dano material, o incidente se tornou um acidente. Segundo Crowl e Louvar (2009), os tipos de acidentes mais comuns em uma indústria química são incêndio, explosão e liberação tóxica.

Após a Segunda Guerra Mundial a indústria química passou por um processo de expansão, marcado pelo rápido surgimento de novas plantas, que, além de muito maiores que as anteriores, passaram a trabalhar com temperaturas e pressões mais altas em seus processos. Como principal resultado desta mudança de cenário, houve um aumento da ocorrência de explosões e incêndios nas indústrias, ou seja, um aumento na ocorrência de acidentes. Tendo em vista este fato, em 1960, o *ICChemE (Institution of Chemical Engineers)* realizou um dos primeiros simpósios no mundo sobre meios de controlar os perigos nas indústrias (ICChemE, 2013).

Diante deste contexto, o fator segurança foi colocado em destaque na indústria química, e uma metodologia já muito utilizada nas indústrias aeroespacial, nuclear e de eletrônicos, a Análise de Riscos, foi adaptada para atender as particularidades da indústria de processos químicos, dando origem a Análise Quantitativa de Riscos de Processos Químicos (AQRPQ). Essa metodologia tem o intuito de identificar áreas para redução de riscos e analisar estratégias de

redução de riscos que tenham uma relação custo-benefício ideal. Ela pode ser aplicada tanto na fase de projeto de uma planta, quanto ao longo de sua vida útil, principalmente durante o *revamp* (reforma) da planta, quando são feitas alterações significativas no processo. Porém, por ser uma metodologia quantitativa e não muito trivial, a AQRPQ requer uma alocação significativa de recursos e mão de obra especializada (CCPS, 2000 e CROWL *et al.*, 2008).

Numa AQRPQ os possíveis cenários de incidentes são identificados e o risco é avaliado através da definição da probabilidade de falha, da probabilidade de várias consequências e do potencial de impacto dessas consequências. As principais etapas de uma AQRPQ são a Análise de Risco, a Avaliação de Risco e o Gerenciamento de Risco (CCPS, 2000).

Como o risco é uma combinação de frequência e consequência, uma das principais fases de uma AQRPQ é a Análise de Consequências (AC), que está inserida na etapa de Análise de Risco da AQRPQ. Como acidentes começam com um incidente, a primeira etapa de uma AC é a seleção de um incidente a ser analisado. Dado um incidente, a segunda etapa da AC consiste na escolha de um modelo fonte, que descreve como o material é descarregado do processo. Em seguida, na terceira etapa, um modelo de dispersão é utilizado para descrever como o material é transportado e se dispersa (CCPS, 2000 e CROWL e LOUVAR, 2009).

A quarta etapa da AC depende do tipo de material liberado. Quando é inflamável, modelos de incêndio e explosão convertem os resultados da etapa anterior em fluxo de calor radiante e sobrepressão da explosão. Quando o material liberado é tóxico, a quarta etapa não é realizada. Na quinta etapa, um modelo de efeito é escolhido, e com isso são estimados os efeitos do acidente em pessoas e na estrutura da fábrica, e, além disso, é possível considerar os impactos ambientais. Na sexta etapa, fatores de mitigação, como sprays de água, sistemas de espuma, evacuação, entre outros, são levados em consideração, e assim o risco pode ser calculado (CCPS, 2000 e CROWL e LOUVAR, 2009). A Figura 1.1 apresenta um esquema com as etapas de uma AC.

Na indústria química, a explosão é o tipo de acidente que apresenta alto potencial de perda econômica, potencial intermediário de fatalidades e probabilidade de ocorrência intermediária, quando comparada a incêndio e liberação tóxica. Incêndios tem alta probabilidade de ocorrência, mas baixo potencial de fatalidades, já liberações tóxicas apresentam alto potencial de fatalidades, mas baixa probabilidade de ocorrer (CROWL E LOUVAR, 2009). Portanto torna-se fundamental

uma melhor compreensão do fenômeno da explosão e de sua modelagem, com o intuito de possibilitar a obtenção de resultados (sobrepessão da explosão) para a realização de uma Análise de Consequências, para que, com base nos resultados da análise, seja possível tomar medidas para evitar ou reduzir os danos de uma possível explosão.

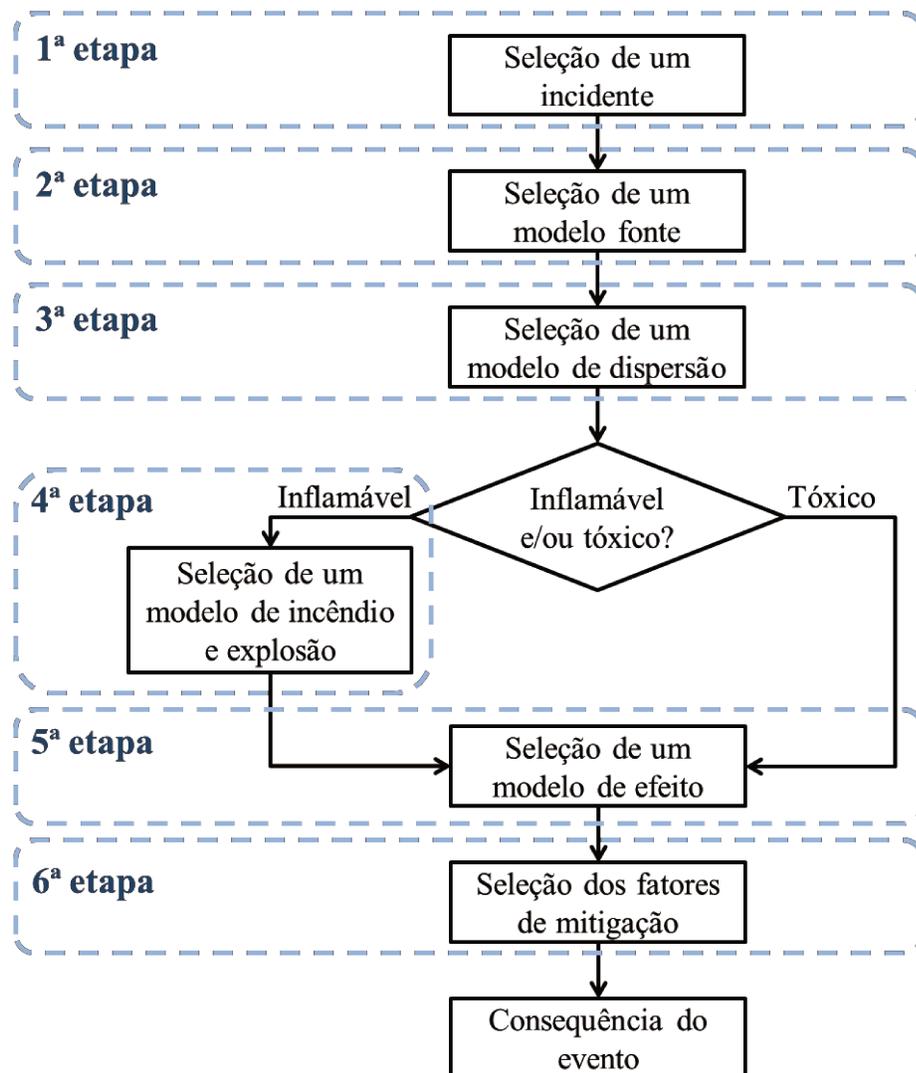


Figura 1.1: Esquema apresentando as etapas de uma Análise de Consequências (Adaptado de: CCPS, 2000).

1.2 EXPLOSÕES

De acordo com Mannan (2012), uma explosão pode ser definida como uma liberação de energia repentina e violenta, onde os principais tipos de energia liberada são a energia física, a química e a nuclear. A explosão de um vaso devido à alta pressão do gás em seu interior é um exemplo de liberação violenta de energia física. Já a explosão de um vaso devido à combustão de um gás inflamável em seu interior representa uma violenta liberação de energia química.

Garrison (1988) *apud* Bjerketvedt *et al.* (1997) analisou os cem maiores acidentes na indústria de hidrocarbonetos que ocorreram de 1957 a 1986, e constatou que a explosão de nuvem de vapor (*vapour cloud explosion*) foi o tipo mais recorrente, com 42% de frequência.

A explosão de nuvem de vapor pode ser descrita como uma combustão que ocorre em uma nuvem de gás composta por uma mistura de combustível e oxidante pré-misturada, que gera um rápido aumento da pressão (BJERKETVEDT *et al.*, 1997). Segundo Crowl *et al.* (2008), quando este tipo de explosão ocorre em ambientes não extremamente confinados e congestionados, normalmente a chama se propaga no modo de deflagração (velocidade de queima menor que velocidade do som). Uma explosão de nuvem de vapor nada mais é do que uma explosão de gás num ambiente não confinado ou parcialmente confinado, portanto o termo explosão de gás será utilizado como um sinônimo de explosão de nuvem de vapor ao longo deste trabalho (BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

De acordo com uma análise feita em 1998 sobre os maiores acidentes em plantas químicas, a explosão de nuvem de vapor foi o tipo de explosão que causou maior prejuízo ao patrimônio da indústria (CROWL e LOUVAR, 2009). Alguns acidentes recentes como o de Buncefield, o da Indian Oil Corporation, o da ConAgra, e, no Brasil, o acidente da Petrobras, exemplificam claramente os efeitos devastadores da explosão de nuvem de vapor em termos de potencial de perda econômica, de perdas humanas e de danos ao meio ambiente.

Em 2005, no depósito de armazenamento de Buncefield, localizado no Reino Unido, uma explosão de nuvem de vapor seguida de incêndio deixou quarenta e três pessoas feridas, e danificou a vizinhança do local, totalizando um prejuízo da ordem de \$ 1,5 bilhão. Essa explosão ocorreu devido ao vazamento de gasolina de um dos tanques de armazenagem (JOHNSON, 2010). A Figura 1.2 mostra os impactos causados pela explosão no local e na vizinhança.



(A)



(B)

Figura 1.2: Fotos do danos provocados pela explosão no interior (A) e no exterior (B) do depósito (Fonte: JOHNSON, 2010).

Em 2009 uma explosão de nuvem de vapor ocorreu no depósito da Indian Oil Corporation, na Índia, também devido a um vazamento de gasolina. Toda a instalação do depósito foi destruída e as construções da vizinhança foram profundamente danificadas (SHARMA *et al.*, 2013). A Figura 1.3 mostra os estragos que foram causados neste acidente.



(A)



(B)

Figura 1.3: Fotos do danos causados pela explosão em um prédio (A) e no estacionamento (B) do depósito (Fonte: SHARMA *et al.*, 2013).

Também em 2009, outra explosão de nuvem de vapor ocorreu nos Estados Unidos na indústria de alimentos ConAgra. O acidente ocorreu devido a um procedimento de purga realizado numa tubulação nova. A purga foi feita com gás natural, e o mesmo foi liberado durante

cerca de duas horas e meia num ambiente relativamente fechado contendo apenas um exaustor, formando a nuvem inflamável. Como resultado três pessoas morreram e setenta e uma ficaram feridas, além disso, 8,16 toneladas de amônia foram lançadas no meio ambiente (CSB, 2010). A Figura 1.4 mostra a fábrica após a explosão.

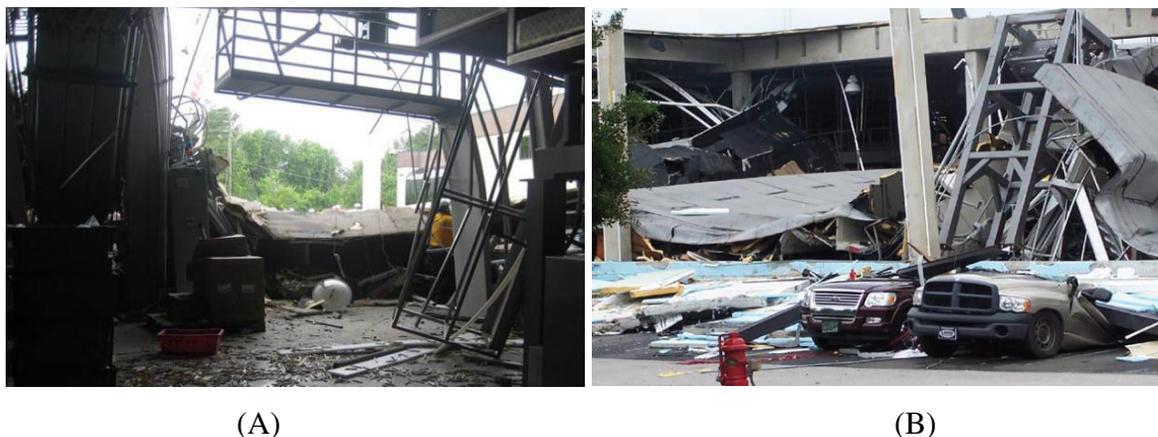


Figura 1.4: Fotos do interior (A) e exterior (B) da fábrica da ConAgra após a explosão (Fonte: CSB, 2010).

Em 2001, um tanque de drenagem de emergência da plataforma P-36 da Petrobras rompeu-se devido à excessiva sobrepressão. Em decorrência disso houve um vazamento de gás e petróleo na plataforma, com subsequente ignição do gás dispersado, causando uma explosão de nuvem de vapor que provocou a morte de 11 pessoas, e fez com que a plataforma afundasse 5 dias depois (DADASHZADEH *et al.*, 2013). A Figura 1.5 apresenta imagens da plataforma após o acidente.

O efeito devastador de uma explosão de gás pode ser estimado por meio de modelos que calculam a máxima sobrepressão gerada. Porém a explosão de gás é um fenômeno muito complexo, e as suas consequências dependem de vários fatores, tais como: tipo de combustível e oxidante, tamanho da nuvem, concentração de combustível na nuvem, localização da ignição, energia da fonte de ignição, tamanho, localização e tipo de *vent* (área de alívio de pressão), localização e tamanho dos equipamentos e estruturas da fábrica, além das medidas de mitigação previamente tomadas. Resumindo, mínimas mudanças nestes fatores podem alterar os efeitos da

explosão, e, portanto, não é uma tarefa muito fácil estimar suas consequências (BJERKETVEDT *et al.*, 1997).



Figura 1.5: Fotos da plataforma P-36 da Petrobras após o acidente, primeiramente tombou (A) e depois afundou (B) (Fonte: (A) EXAME, 2014; (B) FOLHA ONLINE, 2014).

1.3 MODELOS PARA EXPLOSÃO

A sobrepressão de uma explosão de gás pode ser estimada por meio de modelos empíricos, semi-empíricos, fenomenológicos, ou por meio de fluidodinâmica computacional (LEA e LEDIN, 2002). Modelos empíricos e semi-empíricos são capazes de proporcionar estimativas rápidas de sobrepressão ao contrário das obtidas por meio de fluidodinâmica computacional, o que faz com que eles sejam muito utilizados para estimativas iniciais. E segundo Huser *et al.* (2009), estimativas iniciais da sobrepressão são interessantes em fases conceituais de projeto, onde o tempo de resposta é crucial.

A sobrepressão da explosão depende, dentre outros fatores, do grau de confinamento e de obstrução. Em uma indústria, ambientes confinados ou parcialmente confinados apresentam *vents*, que atuam na remoção dos gases da combustão, reduzindo a máxima sobrepressão da explosão. Já com relação ao grau de obstrução, os obstáculos (equipamentos, tubulações, entre outros) atuam aumentando a turbulência, que por sua vez aumenta a taxa de queima e a velocidade da chama gerando uma maior sobrepressão, é um mecanismo *loop feedback* positivo (BJERKETVEDT *et al.*, 1997). Como esses fatores apresentam grande influência na

sobrepressão gerada pela explosão, é importante que eles sejam levados em consideração no modelo de explosão.

O escalonamento é outro fator essencial, já que experimentos realizados com duas escalas diferentes mostraram que quando a escala foi de 1:33 para 1:5 a pressão da explosão aumentou por um fator de 5 a 10 (BJERKETVEDT *et al.*, 1997). Portanto é importante que o modelo seja baseado em dados experimentais em larga escala, e que seja validado em dados do mesmo tipo. Porém esses dados não são facilmente encontrados na literatura.

Existem diversas correlações empíricas e semi-empíricas que foram desenvolvidas para o cálculo da sobrepressão na presença de *vents*. Razus e Krause (2001) apresentam uma comparação entre as principais, porém a maioria delas foi desenvolvida com base em dados de pequena e média escala e geralmente sem a presença de obstáculos internos.

Park *et al.* (2008a) desenvolveram uma correlação que leva em conta a presença e o formato dos obstáculos, entretanto seu modelo foi validado apenas com dados em escala laboratorial. Já Huser *et al.* (2009) desenvolveram uma correlação baseada em dados experimentais e em dados de fluidodinâmica computacional, ambos em larga escala, e considerou a presença de obstáculos. O modelo leva em consideração cinco dentre os vários parâmetros que influenciam a sobrepressão de uma explosão, porém somente a relação entre sobrepressão e o tamanho da nuvem é apresentada, a correlação completa não foi fornecida.

Contudo, além de levar em conta os obstáculos e a escala na correlação, seria interessante utilizar uma abordagem teórica e não somente baseada em dados experimentais. Fakandu *et al.* (2011), por exemplo, relatam duas abordagens que podem ser utilizadas na estimativa da máxima sobrepressão.

1.4 OBJETIVOS

O objetivo principal deste trabalho foi desenvolver um modelo para a estimativa da máxima sobrepressão gerada por uma explosão de gás em regime de deflagração, que leve em consideração a presença de obstáculos em ambientes parcialmente confinados com *vent*, que seja capaz de representar adequadamente dados experimentais de uma explosão em larga escala, que possua uma abordagem teórica e um tempo de resposta curto.

Para atingir tal objetivo, as seguintes metas foram estabelecidas:

- Desenvolvimento da formulação do modelo com fundamentação teórica;
- Implementação do modelo em planilha eletrônica com interface amigável ao usuário;
- Avaliação de desempenho do modelo na estimativa da sobrepressão máxima de uma explosão de gás;
- Comparação dos resultados obtidos com os resultados de modelos já existentes;

1.5 ESTRUTURA DO TRABALHO

A explosão de gás é um fenômeno complexo que envolve os fenômenos de transferência de calor, momento e massa que ocorrem juntamente com reações químicas. Para a sua melhor compreensão é necessário entender o que é combustão, além de alguns conceitos envolvidos, como combustão pré-misturada, turbulência, entre outros, que foram descritos no Capítulo 2.

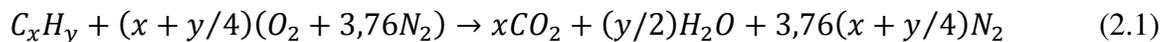
No Capítulo 3, a explosão de gás foi exposta em mais detalhes e a modelagem deste fenômeno foi abordada no Capítulo 4, onde foram apresentados os principais modelos empíricos, semi-empíricos, fenomenológicos, e de fluidodinâmica computacional.

O Capítulo 5 trata da metodologia que foi utilizada no desenvolvimento do modelo proposto, e do procedimento que foi realizado para obtenção dos resultados. O Capítulo 6 traz os resultados obtidos, juntamente com a discussão. E finalmente, o Capítulo 7 apresenta as conclusões que foram obtidas através da análise dos resultados, além de sugestões para trabalhos futuros.

2 COMBUSTÃO

2.1 PRINCIPAIS CONCEITOS

A combustão é um tipo de reação química que envolve a oxidação de um combustível com liberação de calor e frequentemente de luz (BJERKETVEDT *et al.*, 1997). A Equação 2.1 representa a reação química global de combustão de um hidrocarboneto genérico (C_xH_y) balanceada, considerando que o ar é composto apenas de O_2 e N_2 , 21% e 79% em volume, respectivamente (TURNS, 2000).



Para compreender melhor esse fenômeno, torna-se necessário conhecer alguns conceitos básicos como estequiometria, limites de inflamabilidade, energia mínima de ignição e temperatura de autoignição, que serão apresentados nas subseções 2.1.1, 2.1.2 e 2.1.3.

Além disso, é importante saber diferenciar o tipo de combustão a ser estudado, já que isso irá determinar o tipo de resolução. Ela pode ser classificada tanto de acordo com o modo que os reagentes estão misturados (subseção 2.1.4), quanto de acordo com o regime do escoamento (subseção 2.1.5).

2.1.1 Estequiometria

Com base na reação de combustão balanceada, a razão estequiométrica ar-combustível ($(A/F)_{stoic}$) pode ser calculada. Ela é dada pela Equação 2.2, e representa a razão entre as quantidades estequiométricas de ar (m_{air}) e de combustível (m_{fuel}), ambas em massa. A quantidade estequiométrica de oxidante (ar) é descrita como o total de oxidante necessário para queimar completamente a quantidade de combustível existente (TURNS, 2000).

$$(A/F)_{stoic} = \frac{(m_{air})_{stoic}}{(m_{fuel})_{stoic}} \quad (2.2)$$

A mistura ar-combustível pode ser classificada em estequiométrica, rica ou pobre, e o parâmetro razão de equivalência (Φ) é frequentemente utilizado nesta diferenciação. Ele é definido como a razão estequiométrica ar-combustível ($(A/F)_{stoic}$) pela razão ar-combustível

real ((A/F)), e é calculado através da Equação 2.3. Para Φ igual a um, a mistura é estequiométrica. Para Φ maior que um, a mistura é rica em combustível, ou seja, na mistura há menos oxidante que o necessário para consumir todo o combustível presente. E para Φ menor que um, a mistura é pobre em combustível (TURNES, 2000 e VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

$$\Phi = \frac{(A/F)_{stoic}}{(A/F)} \quad (2.3)$$

2.1.2 Limites de inflamabilidade

Para que a mistura ar-combustível entre em combustão, a concentração de combustível na mistura deve estar em uma determinada faixa, com máximo e mínimo dados pelos limites superior (LSI) e inferior (LII) de inflamabilidade. Ou seja, se a mistura ar-combustível for muito rica, ou muito pobre, a combustão não ocorrerá. Estes limites são função da temperatura e da pressão e são determinados experimentalmente (BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

Towler e Sinnott (2013) apresentam uma tabela com limites de inflamabilidade para vários combustíveis em condições ambientes. O metano, por exemplo, apresenta LII de 5,3% e LSI de 14%, ambos em volume.

2.1.3 Ignição

McAllister *et al.* (2011) definem ignição como um mecanismo que leva ao aparecimento de uma reação de combustão vigorosa em uma mistura de reagentes. Normalmente a ignição é classificada em ignição dirigida/ignição forçada (*piloted ignition/forced ignition*) ou em autoignição/ignição espontânea (*auto ignition/spontaneous ignition*).

Na ignição dirigida, uma fonte de energia externa (fonte de ignição) atua aquecendo localmente os reagentes, dando início à reação de combustão vigorosa. Possíveis fontes de ignição são: faíscas, atrito, chama piloto, resistência elétrica, feixe de laser (MCALLISTER *et al.*, 2011). A mínima energia necessária para que a fonte de ignição dê início à combustão é função da concentração de combustível, mas seu valor varia entre 0,1 e 0,3 mJ para a maioria dos combustíveis na temperatura ambiente (BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

Na ignição espontânea, a combustão vigorosa ocorre devido a um processo de auto aquecimento dos reagentes. Com base na teoria térmica, é possível compreender melhor o mecanismo que possibilita a ocorrência deste tipo de ignição. Considerando que a mistura de reagentes está dentro de um vaso, que a taxa de perda de calor para o ambiente (\dot{q}_L) depende linearmente da temperatura dos reagentes, e que a taxa de calor gerado pelas reações químicas (\dot{q}_R) é uma função exponencial da temperatura, quando a taxa de produção de calor pela reação é maior que a taxa de perda de calor para o ambiente ($\dot{q}_R > \dot{q}_L$), o processo de auto aquecimento pode ocorrer, e com isso, a temperatura da mistura aumenta exponencialmente, juntamente com a taxa de reação, dando início à reação de combustão vigorosa (BENSON, 1960 e MCALLISTER *et al.*, 2011).

Para uma determinada condição do sistema (temperatura ambiente, concentração de reagentes, etc), \dot{q}_R será sempre maior que \dot{q}_L , nesse caso a ignição espontânea vai ocorrer sempre. Em outras condições do sistema, a ignição espontânea ocorrerá apenas quando os reagentes atingirem uma determinada temperatura, a chamada temperatura de autoignição (BENSON, 1960 e MCALLISTER *et al.*, 2011). Para a mistura metano-ar, a mínima temperatura de autoignição é aproximadamente 540°C (BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

2.1.4 Combustão pré-misturada e não pré-misturada

A combustão de um gás pode ser classificada em pré-misturada, e não pré-misturada. A primeira ocorre quando combustível e oxidante estão misturados em nível molecular antes que a ignição ocorra, como acontece em um motor de ignição por faísca, por exemplo. Já a combustão em uma vela é um exemplo de combustão não pré-misturada, pois combustível e oxidante são misturados durante o processo de queima (TURNS, 2000 e CANT e MASTORAKOS, 2008).

Para o caso pré-misturado, a chama se move numa direção normal a ela mesma no sentido dos reagentes, com o intuito de consumi-los, ou seja, a chama se propaga. Diferentemente do caso não pré-misturado, cuja chama se mantém entre a superfície existente entre o combustível e o oxidante (CANT e MASTORAKOS, 2008). A Figura 2.1 apresenta um esquema representativo das chamas desses dois tipos de combustão em regime laminar.

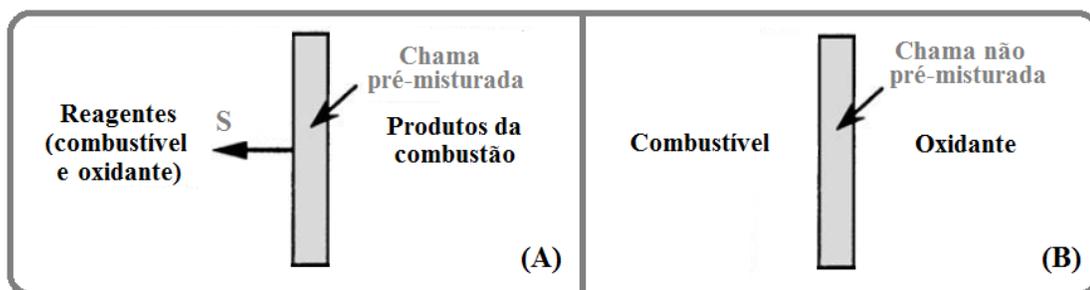


Figura 2.1: Esquema de uma chama da combustão laminar pré-misturada (A) e não pré-misturada (B).

2.1.5 Regimes de combustão

A combustão pode ser classificada de acordo com o tipo de escoamento em laminar ou turbulenta. De acordo com Fox *et al.* (2009), em um escoamento laminar, as partículas do fluido se movem ordenadamente em camadas. No caso turbulento, as partículas do fluido são transferidas entre as camadas devido a flutuações de velocidade tridimensionais aleatórias.

O número de Reynolds é o parâmetro adimensional utilizado para classificar se o regime é laminar ou turbulento. Ele é função da velocidade de escoamento, do comprimento característico da geometria e da viscosidade cinemática. Este parâmetro é representado pela razão entre as forças inerciais e as forças viscosas em um escoamento, portanto, para um alto número de Reynolds, as forças inerciais superam as forças viscosas, e o escoamento é dito turbulento (FOX *et al.*, 2009).

De acordo com Bjerketvedt *et al.* (1997), na maioria das explosões acidentais a chama inicialmente laminar é acelerada e transita para o regime turbulento devido à interação do fluido escoando à frente da chama com obstáculos (equipamentos de processo, tubulações, entre outros). Porém para melhor compreensão da combustão turbulenta, se faz necessário o estudo da combustão laminar, já que muitas teorias sobre a chama turbulenta são baseadas na estrutura da chama laminar (TURNS, 2000). Portanto para melhor entendimento da combustão pré-misturada turbulenta (seção 2.4), a combustão pré-misturada laminar será abordada na seção 2.2, e na seção 2.3 serão introduzidos alguns conceitos sobre escoamentos turbulentos.

2.2 COMBUSTÃO PRÉ-MISTURADA LAMINAR

Algumas definições são importantes para uma melhor compreensão de uma chama pré-misturada laminar. A velocidade com que essa chama se propaga, de que parâmetros ela depende, e em que situação ela atinge seu valor máximo, são os tópicos abordados na subseção 2.2.1, que são importantes, já que a velocidade de propagação determina a taxa de consumo de reagentes, que é um parâmetro importantíssimo na modelagem de uma combustão.

Além disso, é fundamental conhecer a estrutura dessa chama e suas subdivisões, para entender como ela é mantida por meio de um balanço dinâmico entre reação e difusão de calor e massa, que é o foco da subseção 2.2.2.

Para finalizar o estudo da chama pré-misturada laminar, a subseção 2.2.3 trata de um parâmetro da chama muito utilizado na modelagem da combustão, a espessura da chama.

2.2.1 Velocidade de queima laminar da chama

De acordo com Cant e Mastorakos (2008), a propagação é uma propriedade importante da chama pré-misturada, e no caso de uma chama laminar pré-misturada, a sua taxa de propagação é normalmente especificada em termos da velocidade de queima laminar (u_L), que é a velocidade de avanço da chama laminar relativa aos reagentes (que se movimentam), na direção normal à chama e no sentido dos reagentes. Numa combustão pré-misturada, os reagentes se movimentam devido à expansão dos produtos da combustão (BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

Dentro deste contexto torna-se importante saber diferenciar os termos velocidade de queima (*burning velocity* - S_b) e velocidade da chama (*flame speed* - S), já que para misturas estequiométricas ar-hidrocarbonetos a velocidade da chama é em torno de 8 vezes a velocidade de queima. S_b é uma velocidade de avanço da chama relativa aos reagentes (que se movimentam com velocidade S_{ug}) e é representada por u_L no caso de uma combustão pré-misturada laminar. Já S é a velocidade da chama relativa a um observador estacionário. Estas três velocidades estão relacionadas de acordo com a Equação 2.4 e a Figura 2.2 traz um esquema representando-as (ANDREWS e BRADLEY, 1972a e BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

$$S_b = S - S_{ug} \quad (2.4)$$

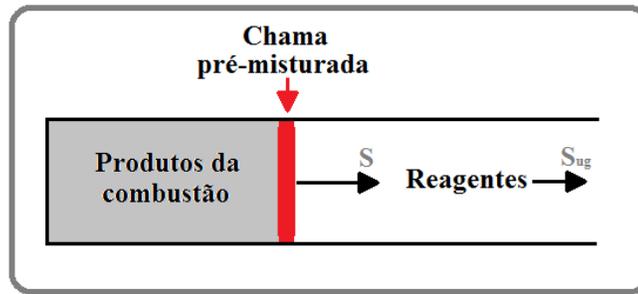


Figura 2.2: Esquema representado a velocidade da chama (S) e a velocidade dos reagentes (S_{ug}) para um observador estacionário no caso de uma combustão pré-misturada dentro de um tubo. A velocidade de queima (S_b) é a diferença entre os vetores S e S_{ug} .

A velocidade de queima laminar (u_L) é função da termoquímica da mistura reagente, ou seja, da pressão, da temperatura e da fração mássica das espécies químicas (CANT e MASTORAKOS, 2008).

Por exemplo, a influência da fração mássica das espécies químicas na velocidade de queima laminar (u_L) foi avaliada por Yan *et al.* (2011). A Figura 2.3 apresenta o gráfico da variação de u_L em função da razão de equivalência (Φ) para a mistura metano-ar a 1 atm e 298 K. Seus dados experimentais (pontos “exp. present”) foram apresentados juntamente com os de outros autores, e com valores calculados por meio de modelos que não foram apresentados em seu trabalho (na Figura 2.3 correspondem às linhas contínua e tracejada, “GRI 3.0” e “GRI 2.11”). Outras misturas ar-combustível também foram avaliadas. Ele constatou que a velocidade máxima ocorre em um ponto onde a mistura está levemente rica, ou seja, num valor de razão de equivalência (Φ) ligeiramente maior que um.

De acordo com Cant e Mastorakos (2008), para a maioria das misturas ar-hidrocarboneto a velocidade de queima laminar apresenta valor máximo em Φ ligeiramente maior que um. Isso ocorre porque a capacidade calorífica dos produtos no caso levemente rico é ligeiramente menor que no caso estequiométrico devido à maior concentração de moléculas diatômicas ao invés de triatômicas, o que causa uma maior temperatura dos produtos e conseqüentemente maior velocidade de queima.

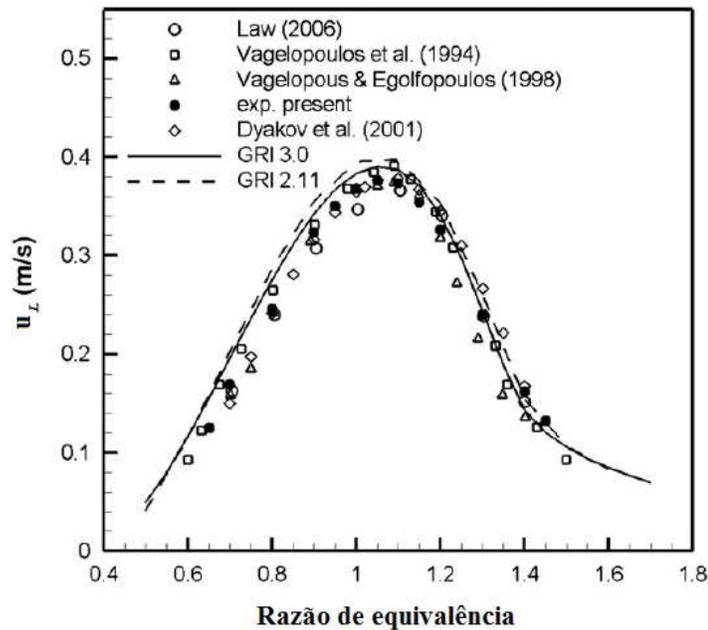


Figura 2.3: Gráfico da velocidade de queima laminar em função da razão de equivalência a 1 atm e 298 K (Adaptado de: YAN *et al.*, 2011).

Em 1972, baseados em dados de vários experimentos, Andrews e Bradley (1972b) propuseram duas correlações para avaliar separadamente os efeitos da temperatura dos reagentes (T_R), Equação 2.5, e da pressão (P), Equação 2.6, na velocidade de queima laminar (u_L) de uma mistura estequiométrica metano-ar. A correlação da temperatura foi obtida com dados a 1 atm e foi avaliada de 150 a 800 K. Já a correlação da pressão foi obtida com dados de temperatura variando de 16 a 27 °C e foi avaliada de 0,1 a 100 atm. Nas Equações 2.5 e 2.6, a velocidade de queima é dada em cm/s, a temperatura em K, e a pressão em atm.

$$u_L = 10 + 3,71 \times 10^{-4} T_R^2 \quad (2.5)$$

$$u_L = 43 P^{-0,5} \quad (2.6)$$

Em 1996, Abu-orf (1996) *apud* Vianna e Cant (2010) desenvolveu uma correlação empírica para o cálculo da velocidade de queima laminar mais complexa, que consegue levar em conta os efeitos da variação da razão de equivalência, da temperatura dos reagentes e da pressão numa só equação, Equação 2.7:

$$u_L = a_{AO} \Phi^{b_{AO}} \exp[-c_{AO}(\Phi - d_{AO})^2] \left(\frac{T_R}{T_{ref}}\right)^{\alpha_{AO}} \left(\frac{P}{P_{ref}}\right)^{\beta_{AO}} \quad (2.7)$$

onde a_{AO} , b_{AO} , c_{AO} , d_{AO} , α_{AO} e β_{AO} são constantes que dependem do tipo de combustível, T_R e P são a temperatura e a pressão dos reagentes, respectivamente, e T_{ref} e P_{ref} são a temperatura e a pressão de referência, respectivamente, e u_L é dada em m/s.

De acordo com Cant e Mastorakos (2008), para a maioria dos hidrocarbonetos, a variação da velocidade de queima laminar com a pressão é fraca, porém a variação com a temperatura dos reagentes é bastante forte.

2.2.2 A estrutura da chama laminar

Segundo Cant e Mastorakos (2008), a chama laminar pré-misturada apresenta uma estrutura típica que pode ser dividida em três partes, a zona de pré-aquecimento, a zona de reação e a zona de equilíbrio. Esta estrutura é mantida por meio de um balanço dinâmico entre reação e difusão de calor e massa e pode ser visualizada através do gráfico da Figura 2.4.

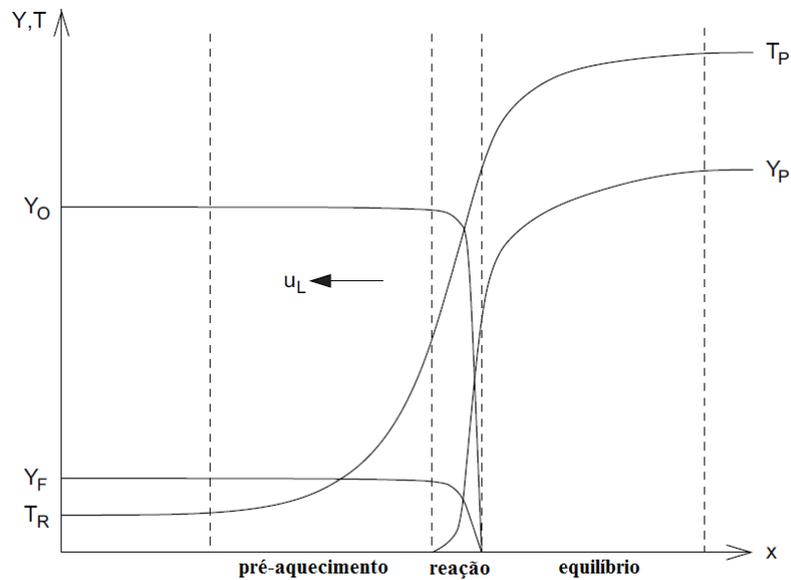


Figura 2.4: Gráfico qualitativo da estrutura da chama dividida em três zonas (Adaptado de: CANT e MASTORAKOS, 2008).

De acordo com Cant e Mastorakos (2008), a zona de reação, localizada na região central, é caracterizada por ser o local onde a maior parte das reações de combustão acontece. Ela é extremamente fina, com espessura muito menor que 1 mm, e as reações de combustão se dão por meio de um complexo mecanismo com a formação de espécies intermediárias. Nesta região a temperatura é alta o suficiente para superar a energia de ativação da reação e, com isso, a taxa de reação é alta. No gráfico da Figura 2.4 pode-se ver que há um alto gradiente de temperatura nesta zona. E que tanto a fração mássica de oxidante (Y_O) quanto a de combustível (Y_F) sofrem uma queda brusca, enquanto que a de produtos (Y_P) aumenta abruptamente.

Como a combustão é uma reação exotérmica, calor é conduzido da zona de reação até os reagentes, aumentando a temperatura dos reagentes, porém este aumento não é suficiente para superar a energia de ativação da reação de consumo de combustível, portanto a taxa de reação química é extremamente baixa na região anterior à zona de reação, a zona de pré-aquecimento. Já a zona de equilíbrio é a região onde a maior parte da liberação de calor ocorre, sendo caracterizada por altas temperaturas, e por ser a região onde ocorre o equilíbrio químico (CANT e MASTORAKOS, 2008).

Para a maioria dos hidrocarbonetos, a espessura da chama inteira, ou seja, das três zonas juntas (pré-aquecimento, reação e equilíbrio), é de aproximadamente alguns milímetros (CANT e MASTORAKOS, 2008).

2.2.3 Espessura da chama laminar

A espessura da chama laminar (δ_L) é um parâmetro de extrema importância na modelagem da combustão. Os experimentos realizados por Andrews e Bradley (1972b) para a mistura metano-ar mostraram que a espessura da chama laminar apresenta um comportamento inverso ao da velocidade de queima laminar, com valor mínimo no ponto onde a mistura está levemente rica (Figura 2.5).

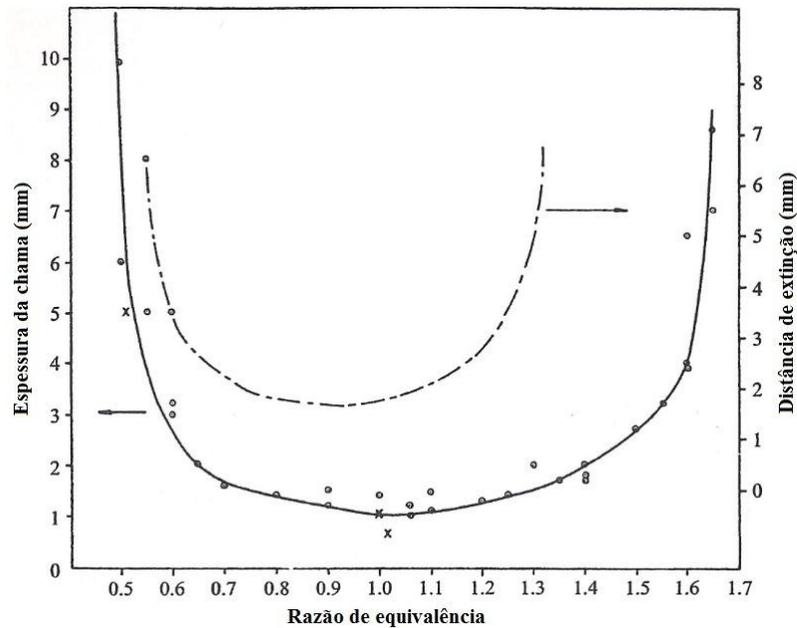


Figura 2.5: Espessura da chama em função da razão de equivalência para a mistura metano e ar (Adaptado de: TURNS, 2000).

Na verdade existem muitas definições para a espessura da chama laminar, e de acordo com Cant e Mastorakos (2008), na prática é difícil determinar este parâmetro com precisão. Jarosinski (1984) apresenta as três definições mais comuns, e somente a mais conhecida será abordada, a espessura característica. Ela é uma medida de comprimento da região em que a mistura não queimada é aquecida até a temperatura de ignição pela zona de reação, e é dada pela Equação 2.8, onde λ é a condutividade térmica, ρ_R é a densidade dos reagentes e C_p é o calor específico à pressão constante.

$$\delta_L = \left(\frac{\lambda}{\rho_R C_p} \right) \frac{1}{u_L} \quad (2.8)$$

Esta abordagem é interessante já que relaciona a espessura da chama à velocidade de queima laminar e leva em conta suas propriedades térmicas. Cant e Mastorakos (2008) apresentam uma expressão alternativa para a Equação 2.8, a Equação 2.9, que é uma simplificação da anterior, já que assume número de Prandtl (Pr) próximo à unidade. O número adimensional de Prandtl é dado pela razão entre a viscosidade cinemática (ν) e a difusividade térmica ($\lambda/\rho_R C_p$).

$$\delta_L = \left(\frac{\lambda}{\rho_R C_P} \right) \frac{1}{u_L} = \left(\frac{\nu}{Pr} \right) \frac{1}{u_L} = \frac{\nu}{u_L} \quad (2.9)$$

Uma vantagem na utilização das Equações 2.8 e 2.9 na estimativa da espessura da chama laminar é que elas independem do detalhamento do perfil local de temperatura da chama, o que as diferem de outras abordagens existentes. Porém deve-se ter certa cautela na escolha dos valores de λ , ρ_R , C_P e ν a serem utilizados, já que esses dependem da temperatura, e essa última varia ao longo da estrutura da chama (CANT e MASTORAKOS, 2008).

2.3 ESCOAMENTOS TURBULENTOS

Na maioria das explosões acidentais a chama inicialmente laminar é acelerada e transita para o regime turbulento, portanto, para uma melhor compreensão da chama pré-misturada turbulenta, é importante entender os principais conceitos sobre escoamentos turbulentos.

Na subseção 2.3.1 serão apresentados os conceitos e termos fundamentais na área de turbulência, que são necessários para o entendimento da sua modelagem. Os escoamentos turbulentos são caracterizados pela presença de turbilhões que possuem escalas de tamanhos diferentes, e estas diferentes escalas são levadas em conta na modelagem da turbulência, por isso elas serão abordadas na subseção 2.3.2. Para finalizar o estudo de escoamentos turbulentos, na subseção 2.3.3 serão brevemente apresentados os principais modelos utilizados nessa área.

2.3.1 Conceitos

Diferente do escoamento laminar, em que o fluido escoar ordenadamente em camadas, no escoamento turbulento, as partículas de fluido são transferidas entre estas camadas por meio de turbilhões, com isso, mesmo quando o escoamento é plenamente desenvolvido, a velocidade em um ponto muda de valor e direção a todo instante, porém oscila em torno de um valor médio (MACHADO, 2002). Esse comportamento flutuante, aleatório e caótico do escoamento turbulento pode ser observado na Figura 2.6.

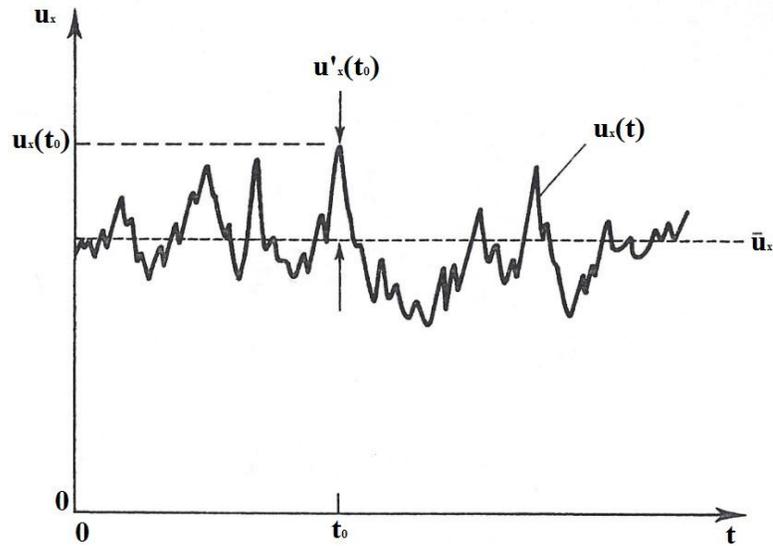


Figura 2.6: Medida da velocidade na direção x em um ponto em função do tempo para um escoamento turbulento (Fonte: TURNNS, 2000).

De acordo com Cant e Mastorakos (2008), uma maneira de caracterizar escoamentos turbulentos e suas flutuações é trabalhando com quantidades médias e flutuantes. Uma dada propriedade ϕ do escoamento pode ser decomposta em uma componente média, $\bar{\phi}$, e uma flutuante, $\phi'(t)$, de acordo com a Equação 2.10, é a chamada decomposição de Reynolds (TURNNS, 2000):

$$\phi(t) = \bar{\phi} + \phi'(t) \quad (2.10)$$

onde, para o caso de uma combustão, ϕ pode ser velocidade, pressão, temperatura, densidade e fração mássica (TURNNS, 2000).

Para a propriedade ϕ , a média, em um intervalo de tempo suficientemente grande (Δt) é dada pela Equação 2.11, que é válida para escoamentos estacionários (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \phi(t) dt \quad (2.11)$$

Segundo Versteeg e Malalasekera (2007) e Cant e Mastorakos (2008), para escoamentos que dependem do tempo, a média da propriedade ϕ no tempo t é dada pela média dos valores

instantâneos da propriedade obtida através de dados de experimentos idênticos repetidos N vezes, e é dada pela Equação 2.12, é a chamada média do conjunto (*ensemble average*).

$$\bar{\phi} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi_i \quad (2.12)$$

De acordo com Versteeg e Malalasekera (2007) dois parâmetros são utilizados para indicar o espalhamento das flutuações de ϕ em relação ao seu valor médio, a variância e o valor quadrático médio (do inglês *root mean square* ou *rms*). A variância pode ser calculada de acordo com a Equação 2.13, e o valor quadrático médio é dado pela Equação 2.14.

$$\overline{\phi'^2} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \phi'^2 dt \quad (2.13)$$

$$\phi'_{rms} = \sqrt{\overline{\phi'^2}} \quad (2.14)$$

Segundo Turns (2000), ϕ'_{rms} representa a intensidade das flutuações turbulentas. Já a intensidade relativa é obtida dividindo-se a intensidade das flutuações turbulentas (ϕ'_{rms}) pelo valor médio ($\bar{\phi}$).

Há também um significado associado à variância das flutuações da velocidade ($\overline{u_1'^2}$, $\overline{u_2'^2}$, $\overline{u_3'^2}$), onde o subscrito 1 indica a direção x , o 2 a y , e o 3 a z). A variância vezes 1/2 representa a energia cinética turbulenta média contida na respectiva flutuação da velocidade. A soma desses valores para as três direções representa a energia cinética turbulenta total em uma dada localização (k), conforme a Equação 2.15 (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

$$k = \frac{1}{2} (\overline{u_1'^2} + \overline{u_2'^2} + \overline{u_3'^2}) \quad (2.15)$$

De acordo com Pope (2000), outro conceito muito importante em turbulência é o de isotropia. Isotrópico significa uniformidade em todas as direções, ou seja, não há preferência direcional. Anisotrópico é o oposto de isotrópico, ou seja, quando há preferência direcional.

2.3.2 Escalas turbulentas

Segundo Pope (2000) é possível observar que os movimentos turbulentos variam em tamanho desde a largura do escoamento até escalas menores, que se tornam cada vez menores conforme o número de Reynolds aumenta.

O escoamento turbulento pode ser fisicamente descrito por turbilhões (*eddies*), que são elementos de fluido macroscópicos em que os elementos microscópicos que o compõe se comportam de certa maneira como uma unidade. Este escoamento contém uma infinidade de turbilhões com diversos tamanhos, ou seja, ele possui uma variedade de escalas de comprimento. Por apresentar essa variedade de escalas de tamanho, o cálculo do escoamento turbulento é complexo (TURNNS, 2000).

Em 1922 Richardson propôs uma descrição física para a turbulência. De acordo com Pope (2000), a ideia de Richardson é que os grandes turbilhões são instáveis e se fragmentam transferindo a sua energia para turbilhões menores. Esses turbilhões pequenos dão origem a turbilhões menores ainda, até que o processo termine com a transformação da energia cinética dos turbilhões muito pequenos em calor. A descrição de Richardson é conhecida como a cascata de energia da turbulência (Cascata de Richardson), onde a energia cinética do fluido está se movendo das maiores para as menores escalas para ser dissipada como calor pela viscosidade (CANT e MASTORAKOS, 2008).

Segundo Pope (2000), na cascata de Richardson os turbilhões de tamanho l possuem uma velocidade característica u e uma escala de tempo τ , dada pela Equação 2.16. Os turbilhões maiores são caracterizados por uma escala de comprimento l_0 , comparável à escala de comprimento do escoamento (\mathcal{L}), e a velocidade característica destes turbilhões (u_0) é da ordem da intensidade turbulenta *rms* (Equação 2.17), que é comparável à velocidade característica do escoamento (U). Portanto, o número de Reynolds desses turbilhões é da ordem de grandeza do número de Reynolds do escoamento, que por sua vez é alto, ou seja, os turbilhões maiores são pouco influenciados pelas forças viscosas. Além disso, os grandes turbilhões são anisotrópicos e são afetados pelas condições de contorno do escoamento.

$$\tau = \frac{l}{u} \tag{2.16}$$

$$u'_{rms} = \sqrt{\frac{2k}{3}} \quad (2.17)$$

A escala de tempo para os turbilhões maiores (τ_0) é dada pela Equação 2.18, e esse parâmetro pode ser interpretado como a escala de tempo necessária para que ocorra a transferência de energia cinética das escalas maiores para as menores (CANT e MASTORAKOS, 2008).

$$\tau_0 = \frac{l_0}{u_0} \quad (2.18)$$

Por apresentar este comportamento descrito como uma cascata de energia, uma importante propriedade do escoamento turbulento é a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ε). A taxa de dissipação é controlada pelos turbilhões maiores e assumindo que a quantidade de energia cinética contida nos turbilhões maiores é proporcional a u_0^2 e a taxa de transferência dessa energia é proporcional a u_0/l_0 , portanto a taxa de energia fornecida para os turbilhões menores é da ordem de u_0^3/l_0 e a taxa de energia cinética dissipada é igual a essa taxa fornecida e é dada pela Equação 2.19 (TENNEKES e LUMLEY, 1989, POPE, 2000 e CANT e MASTORAKOS, 2008).

$$\varepsilon \approx \frac{u_0^3}{l_0} \quad (2.19)$$

Definida a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, as escalas dos turbilhões maiores podem ser expressas em função dela, de acordo com as Equações 2.20 e 2.21 (CANT e MASTORAKOS, 2008).

$$\tau_0 \approx \frac{k}{\varepsilon} \quad (2.20)$$

$$l_0 \approx \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \quad (2.21)$$

As Equações 2.20 e 2.21 podem ser utilizadas para estimativas das escalas integrais, já que essas são da mesma ordem de grandeza que as escalas dos turbilhões maiores (TUNRS, 2000 e CANT e MASTORAKOS, 2008).

Os turbilhões menores foram melhor compreendidos por Kolmogorov (1941) e suas três hipóteses. Ele concluiu que a velocidade e a escala de tempo desses turbilhões diminuem conforme a escala de comprimento diminui (Pope, 2000). Os turbilhões menores são dominados por efeitos viscosos, possuem número de Reynolds igual a um, são isotrópicos e suas escalas de comprimento, tempo e velocidade (microescalas de Kolmogorov) são dadas pelas Equações 2.22, 2.23 e 2.24. Estas equações foram obtidas por Kolmogorov por meio de análise dimensional (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007 e CANT e MASTORAKOS, 2008).

$$\eta = (\nu^3 / \varepsilon)^{1/4} \quad (2.22)$$

$$\tau_\eta = (\nu / \varepsilon)^{1/2} \quad (2.23)$$

$$u_\eta = (\nu \varepsilon)^{1/4} \quad (2.24)$$

As escalas dos turbilhões maiores estão relacionadas com as dos turbilhões menores por meio das Equações 2.25, 2.26 e 2.27, onde Re_t é o número de Reynolds turbulento, e é dado pela Equação 2.28. Estas equações são úteis na estimativa das escalas menores, já que as escalas maiores podem ser estimadas ou medidas mais facilmente. Estimativas das escalas de Kolmogorov são utilizadas na classificação de alguns escoamentos reativos e na determinação da resolução necessária em alguns métodos numéricos e procedimentos experimentais (CANT e MASTORAKOS, 2008).

$$\eta \approx l_0 Re_t^{-3/4} \quad (2.25)$$

$$\tau_\eta \approx \tau_0 Re_t^{-1/2} \quad (2.26)$$

$$u_\eta \approx u_0 Re_t^{-1/4} \quad (2.27)$$

$$Re_t = \frac{u'_{rms} l_0}{\nu} \quad (2.28)$$

2.3.3 Modelagem de escoamentos turbulentos

De acordo com Versteeg e Malalasekera (2007) os métodos para resolução de escoamentos turbulentos podem ser divididos em três grupos: modelos de turbulência para as equações de Navier-Stokes em média de Reynolds (Reynolds *Averaged* Navier-Stokes - *RANS*),

simulação dos turbilhões maiores (*Large Eddy Simulation - LES*) e simulação numérica direta (*Direct Numerical Simulation - DNS*). Dentre os três, o método *RANS* é o que tem sido mais utilizado com aplicação na área de engenharia, e, portanto, somente ele será descrito. Mais informações sobre os outros dois métodos podem ser encontradas em Veynante e Vervisch (2002), Poinso e Veynante (2005) e Versteeg e Malalasekera (2007).

No método *RANS* as equações de balanço que descrevem o escoamento (conservação de massa, de quantidade de movimento e de energia) são transformadas em equações médias por meio da decomposição de Reynolds antes que os métodos numéricos de resolução sejam aplicados, portanto este tipo de modelagem foca nas propriedades médias do escoamento. Devido a esse procedimento matemático, novos termos surgem nas equações de balanço (tensões de Reynolds e fluxos escalares turbulentos) e eles são modelados por modelos de turbulência (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

Segundo Versteeg e Malalasekera (2007) os modelos de turbulência para a modelagem destes termos adicionais são classificados quanto ao número de equações de transporte adicionais que são necessárias para que o escoamento seja resolvido. O modelo de comprimento de mistura (*Mixing length model*) e o modelo $k - \varepsilon$ estão bem estabelecidos. O primeiro é um modelo de zero equação, já que nenhuma equação de transporte adicional é necessária, já o segundo é um modelo de duas equações. Ambos assumem que existe uma analogia entre a ação das tensões viscosas e das tensões de Reynolds no escoamento médio, sendo estas últimas proporcionais à taxa média de deformação, é o conceito *eddy viscosity* (Equação 2.29):

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (2.29)$$

onde $\overline{u'_i u'_j}$ representa as tensões de Reynolds, μ_t é a viscosidade turbulenta (*eddy viscosity*) e δ_{ij} é o delta de Kronecker (igual a um se $i = j$ e igual a zero se $i \neq j$).

Os fluxos escalares turbulentos são considerados proporcionais ao gradiente do valor médio da quantidade transportada, e são dados pela Equação 2.30 (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007):

$$-\rho \overline{u'_i \varphi'} = \Gamma_t \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial x_i} \quad (2.30)$$

onde $\overline{u'_i \varphi'}$ representa os fluxos escalares turbulentos de uma propriedade escalar do escoamento φ e Γ_t a difusividade turbulenta (*eddy diffusivity*).

De acordo com Versteeg e Malalasekera (2007) o transporte turbulento de quantidade de movimento, calor ou massa ocorre devido à mistura causada pelos turbilhões (*eddy mixing*), portanto espera-se que o valor da difusividade turbulenta (Γ_t) seja da ordem de grandeza da viscosidade turbulenta (μ_t), esta é a chamada analogia de Reynolds, e com ela um novo número turbulento de Prandtl/Schmidt é introduzido (σ_t). Ele é dado pela Equação 2.31, e normalmente valores próximos a unidade são utilizados para essa variável.

$$\sigma_t = \frac{\mu_t}{\Gamma_t} \quad (2.31)$$

No modelo de comprimento de mistura a viscosidade turbulenta (μ_t) é descrita como uma função algébrica da posição, com o intuito de descrever as tensões. É uma modelagem mais simples que a $k - \varepsilon$, já que este último utiliza na resolução do problema duas equações de transporte, uma para a energia cinética turbulenta e outra para a dissipação dessa energia. O modelo $k - \varepsilon$ descreve os efeitos de transporte das propriedades turbulentas por convecção e difusão, além de incorporar a produção e destruição da turbulência. Porém ambos os modelos assumem que a viscosidade turbulenta é isotrópica, o que não acontece em muitos escoamentos complexos. Porém esta desvantagem não faz com que eles sejam menos utilizados na modelagem da turbulência, na verdade, eles são modelos bem estabelecidos por serem de relativamente fácil implementação e por já terem sido amplamente validados (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

2.4 COMBUSTÃO PRÉ-MISTURADA TURBULENTA

Uma combustão pré-misturada inicialmente laminar é bastante afetada pela presença da turbulência. A chama laminar que é planar interage com os turbilhões de diferentes escalas de tamanho que atuam enrugando a sua superfície, isso gera um aumento na área da chama, e com isso a taxa de queima torna-se maior, e conseqüentemente a velocidade de propagação aumenta. Em alguns casos a turbulência pode ser tão grande a ponto de perturbar a estrutura da chama, alterando o balanço reativo-difusivo que a sustenta, reduzindo a velocidade de propagação e até

mesmo causando a extinção da chama para o caso de uma turbulência muito intensa (CANT e MASTORAKOS, 2008).

Esta seção trata da chama pré-misturada turbulenta e das suas principais características, como a sua velocidade de queima (subseção 2.4.1). Além disso, os principais números adimensionais dessa área são apresentados (subseção 2.4.2), já que alguns deles são utilizados na determinação do estiramento da chama (subseção 2.4.3) e da sua estrutura (subseção 2.4.4).

2.4.1 Velocidade de queima turbulenta

A propagação é uma propriedade importante da chama pré-misturada. Por analogia com a velocidade de queima laminar é possível definir uma velocidade de queima turbulenta (u_T), como a velocidade de avanço da chama turbulenta relativa aos reagentes, normal a ela mesma e na direção dos reagentes (CANT e MASTORAKOS, 2008).

Diferentemente da velocidade de queima laminar (u_L), a velocidade de queima turbulenta (u_T) não é somente uma função termoquímica da mistura reagente. Ela depende também de características do escoamento turbulento, como da velocidade turbulenta *rms* (u'_{rms}) e da escala de comprimento turbulenta (TURNS, 2000 e CANT e MASTORAKOS, 2008).

Damköhler propôs uma relação útil entre u_L e u_T assumindo que é possível identificar o formato da chama turbulenta e que é possível quantificar a área da sua seção transversal (A), esta relação é dada pela Equação 2.32 (CANT e MASTORAKOS, 2008):

$$\rho_R u_L A_T = \overline{\rho_R} u_T A \quad (2.32)$$

onde $\overline{\rho_R}$ representa a densidade média dos reagentes e A_T é a área superficial da chama enrugada.

De acordo com Cant e Mastorakos (2008), implicitamente a hipótese de Damköhler considera que a estrutura interna da chama laminar enrugada permanece inalterada na presença da turbulência, e por isso forma a base conceitual para a teoria *flamelet* de modelagem das chamas pré-misturadas turbulentas. Porém normalmente é difícil identificar o formato da chama turbulenta e a utilidade da velocidade de queima turbulenta tem sido questionada.

2.4.2 Números adimensionais

Alguns números adimensionais são muito utilizados para caracterizar os escoamentos turbulentos, portanto é importante entender o significado de cada um deles. Dentre os mais utilizados nessa área pode-se citar os números de Schmidt (Sc), Lewis (Le), Reynolds turbulento (Re_t), Damköhler (Da), Karlovitz (Ka) e o de Mach (Ma). A seguir cada um deles será brevemente descrito de acordo com Veynante e Vervisch (2002) e Cant e Mastorakos (2008).

O número de Schmidt é a razão entre a difusão de momentum e a difusão molecular, e é dado pela Equação 2.33, onde μ é a viscosidade dinâmica, ρ a densidade e D_k é a difusividade da espécie química k .

$$Sc_k = \frac{\mu}{\rho D_k} \quad (2.33)$$

O número de Lewis compara a difusão térmica e a molecular, ele é a razão entre o número de Schmidt e o de Prandtl, e é calculado através da Equação 2.34.

$$Le_k = \frac{Sc_k}{Pr} = \frac{\lambda}{\rho c_p D_k} \quad (2.34)$$

O número de Reynolds turbulento, dado pela Equação 2.35, compara o transporte turbulento e as forças viscosas.

$$Re_t = \frac{u'_{rms} l_0}{\nu} \quad (2.35)$$

O número de Damköhler compara as escalas de tempo turbulento (τ_0) e químico (τ_c) e é representado pela Equação 2.36.

$$Da = \frac{\tau_0}{\tau_c} = \frac{l_0}{\delta_L} \frac{u_L}{u'_{rms}} \quad (2.36)$$

Já o número de Karlovitz, dado pela Equação 2.37, compara as escalas de tempo químico (τ_c) com a dos turbilhões pequenos (τ_η).

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_\eta} = \frac{\delta_L}{\eta} \frac{u_\eta}{u_L} \quad (2.37)$$

O número de Karlovitz pode ser escrito em função da escala de comprimento dos turbilhões maiores (l_0) utilizando as Equações 2.19, 2.22 e 2.24, e assumindo número de Reynolds da chama igual a 1. A Equação 2.38 é importante porque com ela é possível relacionar o número de Karlovitz com os números de Damköhler e Reynolds turbulento, Equação 2.39. Com apenas dois destes números é possível caracterizar o tipo de chama da combustão em estudo, e essa classificação será detalhada na subseção 2.4.4.

$$Ka = \left(\frac{u'_{rms}}{u_L} \right)^{3/2} \left(\frac{l_0}{\delta_L} \right)^{-1/2} \quad (2.38)$$

$$Re_t = Da^2 Ka^2 \quad (2.39)$$

E finalmente, o número de Mach, que é definido como a razão entre a velocidade do escoamento (V) e a velocidade local do som (C), Equação 2.40. Para Ma menor que um, o escoamento é subsônico, para Ma maior que um é supersônico. Além disso, para Ma menor que 0,3, o escoamento pode ser considerado incompressível (FOX *et al.*, 2009).

$$Ma = \frac{V}{c} \quad (2.40)$$

2.4.3 O estiramento da chama

O estiramento da chama (*stretch*) pode ser definido como a taxa fracionária de mudança da área superficial chama. Ele influencia o comportamento de propagação da chama e o seu formato. Dois fatores contribuem para o estiramento da chama, a deformação e a curvatura (CANT e MASTORAKOS, 2008).

Segundo Cant e Mastorakos (2008) o estiramento da chama devido à deformação ocorre como resultado da convecção dentro do campo de escoamento ao redor da chama, ou seja, é um efeito hidrodinâmico. Já o estiramento da chama devido à curvatura advém da característica propagativa da chama pré-misturada.

O número de Lewis global, que representa o balanço entre transferência de massa e de calor, determina a resposta da chama pré-misturada à curvatura em termos de propagação. Para a maioria das misturas de hidrocarboneto-ar o número de Lewis é próximo de um, e, portanto, as transferências de calor e de massa estão em balanço. Nesse caso, uma chama convexa na direção

dos reagentes tende a perder calor por condução e se propaga mais lentamente. Já uma chama côncava na direção dos reagentes tende a concentrar calor à sua frente, e, por isso, se propaga mais rapidamente (CANT e MASTORAKOS, 2008).

2.4.4 A estrutura da chama turbulenta

A estrutura da chama turbulenta apresenta algumas variações e pode ser descrita por meio dos números adimensionais de Damköhler e Karlovitz.

A chama pode ser descrita como um *flamelet* (regime de chama fina e enrugada) quando o número de Damköhler é muito maior que um ($Da \gg 1$), ou seja, a escala de tempo químico (τ_c) é muito pequena quando comparada à escala turbulenta (τ_0), o que resulta uma zona de reação fina cuja estrutura interna não é muito afetada pela turbulência, porém esta última enrugada e deforma a superfície da chama (VEYNANTE e VERVISCH, 2002).

Para Damköhler muito menor que um ($Da \ll 1$) a escala de tempo químico é grande quando comparada à turbulenta, ou seja, a reação química é lenta, com isso reagentes e produtos são misturados pela turbulência antes da reação ocorrer. Neste caso a combustão está no regime intitulado reator bem misturado (VEYNANTE e VERVISCH, 2002).

Segundo Veynante e Vervisch (2002), o número de Karlovitz deve ser menor que um ($Ka < 1$) para indicar que o regime é *flamelet*, ou seja, as menores escalas turbulentas têm escala de tempo turbulento (τ_η) maior que a escala de tempo químico (τ_c), indicando que os movimentos turbulentos são muito lentos para afetar a estrutura da chama. Mas há ainda uma subdivisão nessa faixa de número de Karlovitz, para razão u'_{rms}/u_L menor que um a chama é enrugada (*wrinkled flame*), para razão u'_{rms}/u_L maior que um, ou seja, para uma maior intensidade turbulenta relativa, a chama é enrugada com bolsões (*wrinkled flame with pockets*).

Ainda de acordo com Veynante e Vervisch (2002), para número de Karlovitz maior que 1 e menor ou igual a 100 ($1 < Ka \leq 100$), a turbulência consegue afetar a zona de pré-aquecimento da chama, tornando-a mais espessa, mas a zona de reação se mantém fina como a zona de reação de uma chama laminar. A chama está então no regime enrugada e espessa (*thickened wrinkled flame*), também conhecido como zona de reação fina (*thin reaction zone*). Já para número de Karlovitz maior que 100 ($Ka > 100$), as zonas de reação e de equilíbrio são bastante afetadas

pelos turbilhões, e não é mais possível identificar uma estrutura semelhante a de uma chama laminar, a chama está então no regime de chama espessa (*thickened flame*), também conhecido como reator bem misturado (*well stirred reactor*).

O diagrama de Borghi modificado, apresentado na Figura 2.7, reúne todos estes regimes em um gráfico de u'_{rms}/u_L (intensidade turbulenta relativa) em função de l_0/δ_L . Este diagrama é muito útil para definir o regime em que a chama se encontra para que seja feita a escolha da modelagem da combustão, mas a análise é qualitativa, já que é difícil estimar os números adimensionais com um alto grau de precisão (CANT e MASTORAKOS, 2008). De acordo com Veynante e Vervisch (2002) a maioria das aplicações práticas em combustão turbulenta apresenta chama do tipo *flamelet* ou do tipo zona de reação fina.

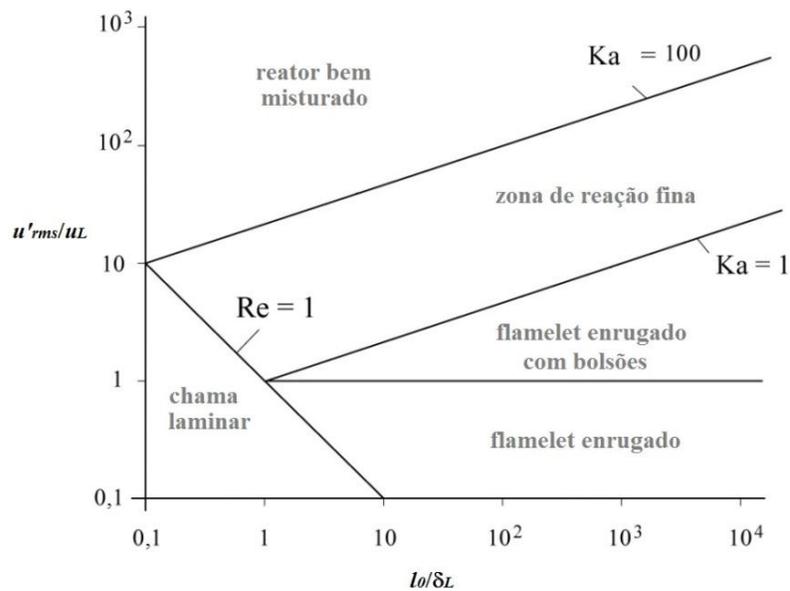


Figura 2.7: Diagrama de Borghi modificado e os possíveis regimes da chama pré-misturada turbulenta (Adaptado de: CANT e MASTORAKOS, 2008).

2.5 EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO DA COMBUSTÃO

Agora que os principais conceitos envolvendo a combustão pré-misturada turbulenta foram apresentados, as equações de conservação que regem o fenômeno serão introduzidas.

A combustão pode ser descrita por meio das equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas. As equações serão apresentadas com notação sufixo, em que i ou j igual a 1 corresponde à direção x , i ou j igual a 2 à direção y e i ou j igual a 3 à direção z (VEYNANTE e VERVISCH, 2002 e VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

A equação da continuidade, que representa a lei conservação de massa na forma diferencial, é dada pela Equação 2.41, onde u_i representa a velocidade na direção i (FOX *et al.*, 2009).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.41)$$

A equação de conservação de quantidade de movimento na forma diferencial (Equação 2.42), obtida a partir da segunda lei de Newton aplicada a uma partícula, descreve o movimento do fluido (FOX *et al.*, 2009). Onde τ_{ij} é o tensor de tensões viscosas, p é a pressão, e F_i são as forças de campo. Normalmente a única força de campo considerada é a gravitacional (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i \quad (2.42)$$

Segundo Veynante e Vervisch (2002) para fluido Newtoniano, o tensor de tensões viscosas é representado pela Equação 2.43, onde o subscrito k representa a espécie química k .

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \quad (2.43)$$

De acordo com Versteeg e Malalasekera (2007), em uma combustão a energia química é liberada na forma de calor e a entalpia resultante pode ser obtida através da resolução da Equação 2.44, a equação de conservação de energia em termos de entalpia. Onde h representa a entalpia da mistura por unidade de massa, h_k é a entalpia específica da espécie k e S_{rad} é o termo fonte que representa a variação de entalpia devido à radiação.

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i h)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_i} + \mu \left(\frac{1}{Sc_k} - \frac{1}{Pr} \right) \sum_{k=1}^N h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial p}{\partial t} + S_{rad} \quad (2.44)$$

A Equação 2.45 representa a conservação de massa da espécie química k e é específica para escoamentos reativos. Nela o fluxo molecular difusivo é descrito pela lei de Fick, Y_k representa a fração mássica da espécie k e $\dot{\omega}_k$ a taxa de reação da espécie k (VEYNANTE e VERVISCH, 2002).

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i Y_k)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad (2.45)$$

Os escoamentos turbulentos podem ser resolvidos pelos métodos *DNS* (*Direct Numerical Simulation*), *LES* (*Large Eddy Simulation*) ou *RANS* (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*), e, portanto, a resolução de escoamentos turbulentos reativos não difere muito disso. Entretanto, com relação ao método *RANS*, como a combustão turbulenta proporciona altas flutuações da densidade devido à liberação de calor localizada, a utilização da média de Reynolds nas equações de conservação se torna um pouco complicada, devido ao surgimento de termos adicionais contendo as flutuações da densidade. Para evitar que estes termos apareçam uma nova média é introduzida, a média Favre, que é uma média ponderada pela densidade, onde a propriedade ϕ do escoamento pode ser decomposta, de acordo com a Equação 2.46, em uma componente média Frave ($\tilde{\phi}$) e outra flutuante (ϕ'') (VEYNANTE e VERVISCH, 2002 e VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (2.46)$$

Na média Frave, a propriedade ϕ do escoamento apresenta média ponderada pela densidade ($\tilde{\phi}$) dada pela Equação 2.47 (VEYNANTE e VERVISCH, 2002).

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} \quad (2.47)$$

Utilizando a média Favre, as equações de conservação do escoamento turbulento reativo (Equações 2.41, 2.42, 2.44 e 2.45) são transformadas em equações médias, e novos termos que precisam ser modelados surgem nessas equações médias. Além das tensões de Reynolds e dos fluxos escalares turbulentos, que também aparecem na modelagem de escoamentos turbulentos (subseção 2.3.3), surge um novo termo que precisa ser modelado, a taxa média de reação química

da espécie k ($\overline{\dot{\omega}_k}$). Portanto um dos principais focos da modelagem da combustão turbulenta é obter uma expressão adequada para essa variável (VEYNANTE e VERVISCH, 2002).

2.6 MODELAGEM DA COMBUSTÃO PRÉ-MISTURADA TURBULENTA

De acordo com Cant e Mastorakos (2008), a maioria das modelagens existentes para a combustão pré-misturada turbulenta assume que a chama está no regime *flamelet*, que, de acordo com o diagrama de Borghi modificado (Figura 2.7), ocorre para $Da \gg 1$, $Ka < 1$ e $Re_t > 1$.

Para chamas que não são fortemente distorcidas pela turbulência, localmente sua estrutura pode ser vista como a de uma chama laminar, esse é o conceito de *flamelet*. A chama é vista como uma interface fina e enrugada que separa os reagentes dos produtos. Considerando o regime *flamelet*, é possível desacoplar a química da turbulência, ou seja, propriedades da chama laminar podem ser usadas para calcular taxas de reação e de transporte locais, e modelos de turbulência padrões podem ser utilizados para o cálculo das principais variáveis do escoamento, o que é uma grande vantagem (CANT e MASTORAKOS, 2008).

De acordo com Cant e Mastorakos (2008), o modelo mais clássico para combustão turbulenta pré-misturada que utiliza o conceito *flamelet* é o BML, que foi proposto por Bray, Moss e Libby. A formulação BML é baseada num argumento físico, dado que a chama pré-misturada turbulenta é constituída por *flamelets* finos, para um dado sensor fixo no espaço, em um dado momento será detectado produto em outro momento reagente, como a chama é muito fina, apenas em um curto espaço de tempo o gás reagindo (a chama) será detectado. Baseando-se nesse argumento, a formulação utiliza uma nova variável, a variável de progresso (c), dada pela Equação 2.48, que é definida como zero nos reagentes e um nos produtos:

$$c = \frac{Y_F - Y_{FR}}{Y_{FP} - Y_{FR}} \quad (2.48)$$

onde Y_{FP} é a fração mássica de combustível nos produtos e Y_{FR} é a fração mássica de combustível nos reagentes.

A formulação BML é extremamente extensa, e foge do escopo deste trabalho descrevê-la por completo. Porém o modelo para a taxa média de reação química ($\bar{\omega}$) é de fundamental importância para o trabalho em questão, e será detalhado na subsecção 5.1.2.

3 EXPLOSÃO DE GÁS

A explosão de gás nada mais é do que a combustão de uma nuvem de gás pré-misturada que contém uma mistura inflamável de oxidante-combustível que gera um rápido aumento da pressão (BJERKETVEDT *et al.*, 1997). Ou seja, para que uma explosão deste tipo ocorra em um ambiente parcialmente confinado, primeiramente deve ocorrer a liberação de material inflamável para formação da nuvem. A nuvem formada deve se misturar com o ar antes da ignição, formando uma mistura inflamável, ou seja, dentro dos limites superior e inferior de inflamabilidade. Só após a ignição ocorrer (ou após a temperatura de autoignição ser atingida) a reação de combustão se inicia, e a chama se propaga consumindo os reagentes.

Segundo Crowl e Louvar (2009), uma explosão resulta de uma rápida liberação de energia. Essa energia liberada é dissipada de várias maneiras, como por exemplo, pela formação de uma onda de pressão, de projéteis, radiação térmica, e energia acústica. E essa energia se dissipando é a responsável pelo dano causado em uma explosão. Para o caso de uma explosão de gás, essa energia faz o gás expandir rapidamente, formando uma onda de pressão que se move para fora a partir da fonte da explosão. Essa onda é a responsável pela maioria dos danos causados nas imediações do local da explosão. Portanto para entender os impactos causados por uma explosão de gás é necessário entender a dinâmica da onda de pressão.

De acordo Bjerketvedt *et al.* (1997) quando o ar é colocado em movimento devido à ocorrência de uma explosão, uma onda é gerada, é a chamada *blast wave* (onda de pressão se propagando no ar). Uma *blast wave* pode conter três tipos de ondas: ondas de compressão sônicas (*sonic compression waves*), ondas de choque (*shock waves*) e ondas de rarefação (*rarefaction waves*). O tipo de onda depende basicamente de como e quando a energia da explosão é liberada e também da distância em relação ao local em que ocorreu a explosão. O gráfico da Figura 3.1 apresenta um esquema representativo destes três tipos de onda.

Uma onda de choque (*shock wave*) pode ser definida como uma onda de compressão totalmente desenvolvida de grande amplitude, na qual ocorre uma mudança abrupta de densidade, pressão e velocidade de partícula. Uma onda deste tipo se propaga com velocidade supersônica (BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

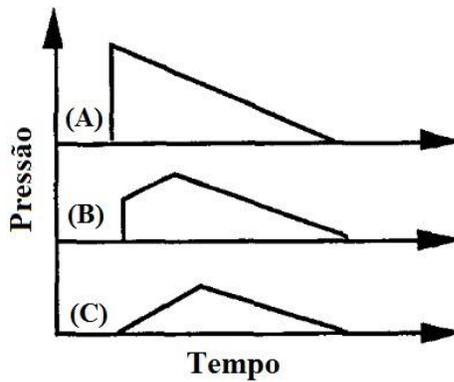


Figura 3.1: Gráfico de pressão num dado ponto ao longo do tempo descrevendo possíveis tipos de *blast waves* em uma explosão.: (A) *shock wave* seguida de *rarefaction wave*, (B) *shock wave* seguida de *sonic compression wave* e *rarefaction wave* e (C) *sonic compression wave* seguida de *rarefaction wave* (Adaptado de Bjerketvedt *et al.*, 1997).

Uma terminologia muito utilizada na área de explosão é a sobrepressão (*overpressure*), portanto é importante saber o seu significado. Ela é definida como a pressão absoluta gerada pela explosão (P_0) menos a pressão atmosférica local (P_a), Equação 3.1 (CROWL e LOUVAR, 2009).

$$P_{red} = P_0 - P_a \quad (3.1)$$

Os danos causados por uma explosão de gás estão associados à sobrepressão gerada. Clancey (1972) *apud* CCPS (2000) apresenta estimativas de danos causados a estruturas de acordo com a sobrepressão da explosão. A Tabela 3.1 exhibe algumas das suas estimativas.

Tabela 3.1: Estimativas de danos causados em estruturas de acordo com a sobrepressão gerada pela explosão (Adaptado de: CCPS, 2000).

Sobrepressão (bar)	Dano estimado
0,0103	Valor típico para quebra de vidros
0,069	Demolição parcial de casas, tornando-as inabitáveis
0,138	Colapso parcial de muros e telhados de casas
0,345 – 0,482	Destruição quase completa de casas
0,689	Provável destruição total de construções; máquinas pesadas (7.000 lb) deslocadas e bastante danificadas; máquinas muito pesadas (12.000 lb) sobrevivem

Outro importante aspecto no estudo das explosões de gás é saber diferenciar a explosão quanto ao modo de propagação da chama (deflagração e detonação) e de acordo com o local em que ocorre (confinada, parcialmente confinada e não confinada), já que a sobrepressão gerada e, conseqüentemente, o seu impacto, dependem desses fatores. Essa diferenciação será feita na seção 3.1.

Como o escopo deste trabalho é o desenvolvimento de um modelo para a estimativa da sobrepressão máxima de uma explosão no modo de deflagração, os principais fatores que influenciam este tipo de explosão serão discutidos na seção 3.2.

3.1 CLASSIFICAÇÃO DAS EXPLOSÕES

3.1.1 Quanto ao modo de propagação

De acordo com o modo de propagação da chama, a explosão pode ser classificada em deflagração ou detonação.

Bjerketvedt *et al.* (1997) afirma que no modo de deflagração, a chama se propaga com velocidade de queima (S_b) menor que a velocidade do som, ou seja, com velocidade subsônica. Isso ocorre porque a energia da zona de reação é transferida para os reagentes por condução de calor e difusão molecular, que são processos relativamente lentos. A onda de pressão de uma deflagração se afasta da zona de reação com a velocidade do som (CROWL e LOUVAR, 2009). A velocidade da chama (S) pode variar de 1 a 1.000 m/s, o que corresponde a pressões variando na faixa de micro bar até bar. (BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

Em algumas reações de combustão, a zona de reação é propagada por uma forte onda de pressão, que comprime rapidamente os reagentes logo à frente da chama acima de suas temperaturas de autoignição. Como essa compressão ocorre rapidamente, há uma variação de pressão repentina, resultando em uma onda de choque (*shock wave*) localizada logo à frente da zona de reação (CROWL e LOUVAR, 2009). Portanto no modo de detonação, a chama se propaga com velocidade de queima maior que a velocidade do som (supersônica), com

velocidade da chama (S) de até 2.000 m/s, com pressões máximas próximas a 20 bar (BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

Segundo Bjerketvedt *et al.* (1997), a propagação da chama no modo de detonação pode ocorrer quando uma alta carga explosiva é detonada, ou quando a chama no modo deflagração é acelerada e transita para a detonação.

Normalmente as explosões de nuvem de vapor se propagam no modo de deflagração, porém se o ambiente é muito confinado e congestionado a chama pode acelerar ao ponto de transitar para a detonação (CROWL *et al.*, 2008).

De acordo com Crowl e Louvar (2009), independente de se propagar no modo de deflagração ou detonação, numa explosão de gás a zona de reação se propaga na direção dos reagentes com uma onda de pressão à sua frente, e mesmo após todo o reagente ter sido consumido e a zona de reação não mais existir, a onda de pressão continua a se movimentar até certo ponto.

3.1.2 Quanto ao local em que ocorre

De acordo com o local em que ocorre, a explosão de gás pode ser do tipo confinada, parcialmente confinada ou não confinada.

A explosão confinada, também conhecida como explosão interna, é a que ocorre dentro de tanques, de equipamentos do processo, de tubulações e salas fechadas. Devido à condição de confinamento existente, uma taxa de combustão baixa pode causar um grande aumento de pressão, já que, apesar destes ambientes não serem completamente fechados, a liberação dos produtos gerados pela combustão é muito lenta de modo que a pressão gerada não é aliviada suficientemente rápido. Este tipo de explosão pode resultar em perda de contenção com subsequentes ondas de choque fortes (BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

Já a explosão parcialmente confinada, ocorre em compartimentos parcialmente abertos, como, por exemplo, em um módulo *offshore*. A pressão gerada pode ser aliviada por meio de áreas conhecidas como *vents*, que atuam na remoção dos gases quentes da combustão. O *vent* pode ser simplesmente uma área aberta em uma parede, ou um painel que abre rapidamente quando a sobrepressão atinge certo nível. A pressão gerada por este tipo de explosão pode variar

muito, e depende de vários fatores, tais como localização e área do *vent*, localização da ignição, entre outros (BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

Uma explosão não confinada é a que ocorre em áreas abertas, como, por exemplo, em uma planta de processo, uma refinaria. Uma explosão de gás em uma área não confinada e não obstruída (sem obstáculos) gera sobrepressão pequena. Porém normalmente uma planta possui várias obstruções (equipamentos, tubulações, entre outros) que irão causar altas sobrepressões (BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

3.2 FATORES QUE INFLUENCIAM A DEFLAGRAÇÃO

Os principais fatores que influenciam a pressão gerada por uma deflagração serão apresentados a seguir. Todas as informações foram extraídas de Bjerketvedt *et al.* (1997), que explicam a influência destes fatores na velocidade de propagação e na máxima pressão da explosão embasados em dados experimentais de vários autores.

3.2.1 Obstruções

Se uma chama se propaga num ambiente parcialmente confinado com obstáculos (obstruções) ao longo do caminho ela é acelerada devido à turbulência e com isso a sobrepressão máxima da explosão aumenta.

Isso acontece porque quando a chama consome os reagentes, os produtos formados se expandem (expansão de 8 a 9 vezes o volume inicial), e com isso os reagentes, que estão na frente da chama, são empurrados, e devido à interação do escoamento com os obstáculos (equipamentos, tubulações), um campo turbulento pode ser gerado. Quando a chama se propaga por este campo turbulento, os turbilhões atuam enrugando a área da chama, e com isso a taxa de queima aumenta, proporcionando uma maior velocidade de propagação da chama, aumentando a sobrepressão gerada pela explosão e aumentando mais ainda a turbulência à frente da chama. Este mecanismo de aceleração da chama é um *loop feedback* positivo, e pode ser visualizado na Figura 3.2. Porém é importante ressaltar que se a chama passa de um ambiente obstruído para um não obstruído (sem obstáculos), ela tende a desacelerar.

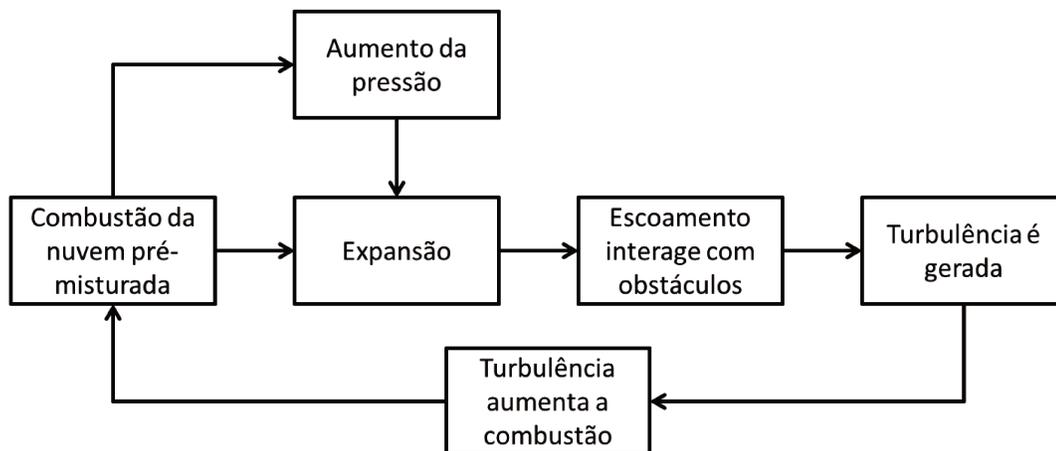


Figura 3.2: Esquema representando o mecanismo *feedback* positivo de aceleração da chama devido à presença de obstáculos (Adaptado de: BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

A sobrepressão gerada por uma explosão em um ambiente com obstáculos é função da razão de bloqueio de volume (*VBR*). Para um dado volume do processo, a *VBR* é a razão entre o volume ocupado por obstruções (equipamentos, tubulações, vigas, etc) sobre o volume total da região a ser analisada (CCPS, 2014). Quando maior a *VBR*, maior o volume ocupado por obstáculos no processo, e, portanto, maior a sobrepressão gerada pela explosão.

A razão de bloqueio de área (*ABR*) é outro fator que exerce influência na sobrepressão da explosão. Ela é dada pela razão entre a área da seção transversal ao escoamento que está bloqueada sobre a área da seção transversal total. Quando maior a *ABR*, menor a área disponível para o escoamento dos gases e com isso a velocidade do escoamento aumenta, gerando mais turbulência e conseqüentemente a sobrepressão gerada é maior.

Porém a *VBR* e a *ABR* não são os únicos parâmetros que influenciam a sobrepressão gerada, o tamanho do obstáculo também é importante, já que para uma mesma *VBR* num mesmo volume, obstáculos com dimensões menores geram maiores sobrepressões. Isso acontece porque para uma mesma *VBR* é necessário um número maior de obstáculos pequenos do que de obstáculos grandes para preencher o mesmo volume, e com isso surgem mais camadas de cisalhamento que aumentam a turbulência gerada e conseqüentemente a sobrepressão da explosão.

A sobrepressão gerada também é afetada pelo formato dos obstáculos. Para uma mesma *VBR*, obstáculos com pontas produzem uma intensidade turbulenta maior que obstáculos

arredondados. E este efeito é mais pronunciado para baixos valores de *VBR*, ou seja, para ambientes pouco obstruídos.

A localização também é outro fator relevante, já que, para um mesmo valor de *VBR*, obstáculos não alinhados tendem a gerar maiores sobrepressões, que obstruções alinhadas uma atrás do outra.

3.2.2 Confinamento

Ambientes confinados ou parcialmente confinados possuem *vents*, que atuam na remoção dos gases quentes da combustão, e, portanto, diminuem até certo ponto a turbulência nos reagentes, já que diminuem o efeito da expansão dos produtos, e com isso as sobrepressões geradas em um ambiente com *vent* são menores. *Vents* também podem ser utilizados para remover os reagentes, mas para serem efetivos na redução da sobrepressão devem direcionar o escoamento para longe dos obstáculos.

Quando maior a área do *vent*, menor o grau de confinamento, a remoção de gases é mais efetiva, e, portanto, menores sobrepressões são geradas.

A localização do *vent* influencia a sobrepressão gerada, para um mesmo grau de confinamento, *vents* distribuídos geram menores sobrepressões que um *vent* localizado o mais longe possível do ponto de ignição.

A presença de um *vent* possui efeito contrário ao da presença de obstáculos no aumento da pressão em uma deflagração, ou seja, o *vent* atua reduzindo a sobrepressão, ao passo que os obstáculos atuam aumentando, e é o balanço entre esses dois fatores que determina a pressão máxima gerada. Portanto os efeitos provocados por estes dois fatores devem ser levados em consideração na análise de uma explosão.

3.2.3 Outros fatores

A energia da fonte de ignição e sua localização, o tipo de combustível, a concentração de combustível na nuvem, o tamanho e localização da nuvem, também afetam as consequências de uma deflagração.

Quanto maior a energia da fonte de ignição, maior o impacto da explosão. E quando ela ocorre em locais próximos ao *vent* a pressão gerada é menor, já que os gases da combustão saem mais rapidamente pelo *vent* e assim a turbulência nos reagentes é menor.

Diferentes combustíveis submetidos às mesmas condições experimentais geram impactos diferentes. Qualitativamente falando, hidrogênio e acetileno geram maiores pressões, que propano e etano, e esses últimos geram maiores pressões que metano. Quanto à concentração de combustível, as maiores sobrepressões são obtidas para misturas ar-combustível levemente ricas (razão de equivalência um pouco maior que um). Concentrações próximas aos limites de inflamabilidade (*LII* e *LSI*) proporcionam baixas taxas de queima e conseqüentemente menores sobrepressões.

Com relação ao tamanho da nuvem, quanto maior seu tamanho, maior a quantidade de material a ser queimada, e com isso, maior a sobrepressão gerada pela explosão.

Além disso, a escala é um fator importantíssimo, já que experimentos em pequena escala não são capazes de representar o comportamento real de uma explosão de gás em um ambiente industrial. Claramente a máxima pressão de uma explosão aumenta conforme a escala de comprimento aumenta, por isso, simples leis de escalonamento não se aplicam para situações em larga escala.

De fato, há uma imensa variedade de fatores que influenciam a máxima pressão de uma deflagração, portanto não é uma tarefa fácil estimá-la. Somente resolvendo as equações da fluidodinâmica do escoamento é possível levar todos estes fatores em consideração. Porém o tempo computacional para resolvê-las pode ser grande, e por isso os modelos mais simples, que levam somente os principais parâmetros em consideração ainda apresentam bastante utilidade, principalmente para estimativas iniciais.

4 MODELAGEM DA EXPLOSÃO DE GÁS

Uma das principais etapas em uma Análise de Consequências de uma explosão de gás é a modelagem da explosão. Nesta etapa, segundo o CCPS (2000), os principais parâmetros estimados são a máxima sobrepressão gerada pela explosão e o fluxo de calor radiante.

Diversos fatores influenciam a sobrepressão gerada em uma explosão de gás (seção 3.2). Segundo Lea e Ledín (2002) um modelo de explosão ideal deveria levar todos estes fatores em conta, além disso, o modelo deveria ser capaz de representar adequadamente a física do fenômeno, ser capaz de lidar com vários tipos de combustíveis e geometrias sem precisar de ajuste de constantes, e finalmente, ser de fácil utilização. E ainda, o código computacional em que o modelo de explosão ideal é implementado deveria ser numericamente preciso, permitir uma representação precisa da geometria, ser de fácil utilização, e ter um tempo de resposta curto. Normalmente modelos complexos que representam adequadamente a geometria possuem um tempo de resposta mais longo, e modelos que apresentam tempo de resposta curto apresentam uma descrição física do fenômeno muito superficial, portanto é muito difícil atender a todos os requisitos de um modelo de explosão ideal.

De acordo com Lea e Ledín (2002) a sobrepressão de uma explosão de gás pode ser estimada por meio de modelos empíricos, semi-empíricos, fenomenológicos, ou por meio de fluidodinâmica computacional. A escolha do modelo a ser utilizado depende basicamente de três fatores, nível de detalhamento requerido, nível de precisão necessário e tempo de resposta desejado. Nas seções 4.1, 4.2 e 4.3 serão descritos os principais modelos disponíveis para o cálculo da sobrepressão de uma explosão de gás.

4.1 MODELOS EMPÍRICOS E SEMI-EMPÍRICOS

Modelos empíricos são basicamente correlações obtidas através da análise de dados experimentais (LEA e LEDIN, 2002). Já modelos semi-empíricos levam em conta algumas considerações teóricas além dos dados experimentais.

De acordo com CCPS (2000) os principais modelos empíricos ou semi-empíricos de explosão de gás utilizados na área de Análise de Consequências são os métodos Equivalência de TNT, TNO multi-energia e Baker-Strehlow. Eles serão brevemente apresentados na subseção

4.1.1, e fornecem estimativas da máxima sobrepressão gerada por uma onda de pressão (*blast wave*) em função da distância relativa ao ponto de ignição (CCPS, 2000).

Já os modelos que levam em conta o efeito da presença do *vent* na explosão (NFPA, Bradley e Mitcheson, Cabbage e Simmonds, Yao e Fakandu *et al.*) serão apresentados na subseção 4.1.2. Os modelos que além de considerarem a área do *vent*, levam em conta o efeito da presença de obstáculos na sobrepressão da explosão (Park, Lee e Green e Huser, Foyn e Skottene) aparecem na subseção 4.1.3.

4.1.1 Equivalência de TNT, TNO multi-energia e Baker-Strehlow

O método Equivalência de TNT considera que existe certa equivalência em termos de energia entre uma explosão de gás e uma explosão de TNT (trinitrotolueno), que é dada pela Equação 4.1 (CCPS, 2000):

$$W_{TNT} = \frac{\eta_{TNT} W_{HC} E_C}{E_{TNT}} \quad (4.1)$$

onde W_{TNT} é a massa de TNT equivalente, η_{TNT} o fator empírico de eficiência da explosão, W_{HC} a massa de hidrocarboneto na nuvem, E_C o calor de combustão do gás inflamável e E_{TNT} o calor de combustão do TNT.

De acordo Bjerketvedt *et al.* (1997) as explosões de TNT já foram amplamente estudadas e dados experimentais de sobrepressão máxima em função da distância de acordo com a massa de TNT estão disponíveis. Com esses dados e com o valor calculado da massa de TNT equivalente (W_{TNT}) é possível estimar a sobrepressão de uma explosão de gás em função da distância.

Uma explosão de gás apresenta diferenças significativas com relação a uma explosão de TNT, já que explosões de TNT apresentam sobrepressões maiores e quedas de pressão mais rápidas (LEA e LEDIN, 2002). O modelo não leva em conta a geometria da explosão, além disso, o fator η_{TNT} utilizado no modelo é empírico e depende de dados experimentais para ser estimado (BJERKETVEDT *et al.*, 1997). Apesar disso, o modelo é amplamente utilizado para estimativas iniciais por ser simples, de fácil implementação, e por possuir tempo de resposta curto (Crowl e Louvar, 2009).

Já o método TNO multi-energia é um pouco mais sofisticado que o TNT. Ele considera que a energia da explosão depende muito mais do nível de obstrução e confinamento do que do combustível na nuvem (CCPS, 2000). Ele é baseado em resultados de simulações numéricas de uma onda de pressão gerada pela ignição central de uma nuvem esférica com velocidade de chama constante. Foram feitas simulações variando a velocidade da chama de modo a se ter um conjunto de curvas com diferentes forças de explosão (BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

Uma vez que o volume da nuvem é conhecido, os volumes individuais de áreas da planta que contribuem para a geração de altas sobrepressões (V_{ind}) são estimados (áreas confinadas e/ou obstruídas), e a energia de combustão para cada área (E_{ind}) é estimada pela Equação 4.2, onde é considerado que a quantidade de energia de combustão de uma mistura estequiométrica hidrocarboneto-ar não varia muito com o tipo de hidrocarboneto (CCPS, 2000 e LEA e LEDIN, 2002).

$$E_{ind} \approx 3,5 \times 10^6 V_{ind} \quad (4.2)$$

Para cada uma dessas áreas da planta é atribuído um valor de força da explosão de acordo com o grau de confinamento e/ou obstrução da área. Esse valor varia de 1 a 10, onde 10 é o nível máximo de força e representa uma detonação. Com o valor da energia de cada área em mãos e com as dez curvas das simulações numéricas, uma para cada nível de força, é possível estimar a sobrepressão de cada área em função da distância, e a sobrepressão total é dada pelo somatório desses valores (CCPS, 2000).

O método TNO multi-energia é rápido e se baseia em dados numéricos de uma explosão de nuvem de vapor ao invés de dados experimentais de uma explosão de TNT, porém a geometria da explosão é levada em conta de forma indireta e subjetiva, e, além disso, depende do usuário na escolha do parâmetro força da explosão.

O método Baker-Strehlow é um pouco mais sofisticado que o TNO multi-energia. Ele é baseado em observações experimentais de que a velocidade da chama está relacionada ao efeito combinado de três fatores, a reatividade do combustível, a densidade dos obstáculos e o confinamento. Cada um desses três fatores apresenta três subdivisões, a reatividade do combustível pode ser alta, média ou baixa, a densidade dos obstáculos também pode ser alta média ou baixa, e o confinamento é baseado em três simetrias, de ponto, de linha e de plano, que

correspondem respectivamente à chama esférica, cilíndrica e planar. Para cada uma das 27 combinações possíveis desses três fatores, há um valor de velocidade da chama que é baseado em dados experimentais. Quando os três fatores são determinados pelo usuário, a velocidade da chama pode ser obtida, e através de curvas existentes para cada uma dessas velocidades a sobrepressão em função da posição é determinada (CCPS, 2000).

Da mesma forma que os métodos Equivalência de TNT e TNO multi-energia, o método Baker-Strehlow apresenta um tempo de resposta curto. A geometria é levada em conta de forma ainda um tanto quanto subjetiva, já que o fator densidade de obstáculos depende da razão de bloqueio de área e do espaçamento entre os obstáculos (*pitch*), e de acordo com a faixa de valor em que essas duas variáveis se encontram a densidade é escolhida.

Apesar da simplicidade dos três modelos descritos, eles são bastante utilizados na área de Análise de Consequências, inclusive o software comercial dessa área, o *Phast* da *DNV GL*, disponibiliza os três para que o usuário possa efetuar a estimativa da sobrepressão (*DNV GL*, 2014). Além disso, atualmente ainda são feitos esforços no sentido de aperfeiçoar alguns desses métodos, por exemplo, Pitblado *et al.* (2014) apresentam algumas orientações com o intuito facilitar a implementação consistente do método TNO multi-energia.

4.1.2 Modelos que consideram a presença do vent

Razus e Krause (2001) apresentam uma comparação entre os principais modelos empíricos e semi-empíricos que levam em conta a área do *vent* no cálculo da sobrepressão da explosão de gás. Eles foram obtidos a partir de dados experimentais em pequena e média escala, sem a presença de obstáculos internos. Em geral são correlações simples que possuem certas restrições de uso e são válidas para certas faixas de valores de alguns parâmetros. Somente quatro dos dez modelos apresentados por Razus e Krause (2001) são brevemente apresentados, com o intuito demonstrar a simplicidade desses modelos.

Porém é importante ressaltar que recentemente Sustek e Janovsky (2013) fizeram uma compilação de 34 equações deste tipo disponíveis na literatura com o intuito de categorizá-las e apontar a de aplicação mais universal. Entretanto, devido à existência de parâmetros não muito bem especificados pelos autores das correlações, ou a descrições não muito claras dos procedimentos de cálculo, eles conseguiram avaliar apenas 16 das 34 equações. E dentre as

equações avaliadas, algumas, mesmo sendo utilizadas dentro da sua faixa de aplicabilidade, produziram resultados inaceitáveis. Ou seja, essas equações possuem aplicabilidade um tanto quanto restrita.

A correlação NFPA 68 (*National Fire Protection Association*) foi desenvolvida para estruturas de baixa força, sem restrições com relação ao formato do vaso, e é dada pela Equação 4.3 (RAZUS e KRAUSE, 2001 e MANNAN, 2012):

$$P_{red} [bar] = \frac{(C_{NFPA}A_S)^2}{A_V^2} \quad (4.3)$$

onde C_{NFPA} é uma constante que depende do tipo de combustível, A_S é a área superficial interna do local em que ocorre a explosão e A_V é a área do *vent*. É uma correlação extremamente simples, e na comparação feita por Razus e Krause (2001) foi em geral a que apresentou os maiores valores de sobrepressão.

De acordo com Razus e Krause (2001) as correlações de Bradley e Mitcheson (Equações 4.4 e 4.5) foram desenvolvidas para explosões em vasos esféricos com ignição central, e a equação a ser utilizada é escolhida de acordo com a pressão de ativação do *vent*.

$$P_{red} [bar] = 2,43 \left(\frac{\bar{A}}{\bar{S}_o}\right)^{-0,6993} \quad (4.4)$$

$$P_{red} [bar] = 12,46 \left(\frac{\bar{A}}{\bar{S}_o}\right)^{-2} \quad (4.5)$$

Ambas são baseadas em dois parâmetros adimensionais (\bar{A} e \bar{S}_o) representados pelas Equações 4.6 e 4.7. O primeiro representa a razão entre a área do *vent* (A_V) sobre a área superficial do vaso (A_S) ponderada pelo coeficiente de descarga (C_d).

$$\bar{A} = \frac{C_d A_V}{A_S} \quad (4.6)$$

Já o segundo parâmetro é a razão entre a velocidade dos gases não queimados à frente da chama ($S_b(E - 1)$) sobre a velocidade do som nos gases não queimados (C), onde E representa a razão de expansão.

$$\bar{S}_o = \frac{S_b(E-1)}{C} \quad (4.7)$$

Razus e Krause (2001) também apresentam a correlação de Cubagge e Simmonds (Equação 4.8), que é similar a de Bradley e Mitcheson, pois é baseada nos mesmos parâmetros adimensionais.

$$P_{red} [bar] = 0,365 \left(\frac{\bar{A}}{\bar{s}_o} \right)^{-1} \quad (4.8)$$

A correlação de Yao (Equação 4.9) também se baseia nos parâmetros adimensionais utilizados por Bradley e Mitcheson, mas o grande diferencial é o aparecimento do parâmetro ajustável χ que representa o fator de correção do estiramento da chama, também chamado de fator de turbulência. Segundo Park *et al.* (2008a) ele é dado pela razão entre a área superficial da chama turbulenta pela da laminar. De acordo com Razus e Krause (2001) este parâmetro é normalmente igual a quatro, mas pode variar de acordo com o tipo de *vent*.

$$P_{red} [bar] = \left[\frac{0,375 \chi^{0,675} E^{7/6}}{E-1} \right]^2 \left(\frac{\bar{A}}{\bar{s}_o} \right)^{-2} \quad (4.9)$$

Fakandu *et al.* (2011) apresentam duas abordagens teóricas que podem ser utilizadas na estimativa da máxima sobrepressão de uma explosão de gás em um ambiente com *vent*, e uma delas foi utilizada no desenvolvimento de sua correlação. A primeira considera que a máxima sobrepressão ocorre quando a máxima vazão mássica de gás não queimado pelo *vent* é igual a máxima taxa de consumo de gás não queimado na frente de chama. A segunda considera que ela ocorre quando a máxima vazão mássica de gás não queimado pelo *vent* é igual a máxima vazão mássica de gás não queimado deslocado pela frente de chama. Segundo Fakandu *et al.* (2011) a segunda abordagem fornece valores de sobrepressão maiores quando comparados com os obtidos com a primeira, e portanto foi a abordagem escolhida para ser utilizada no desenvolvimento da correlação, que é representada pela Equação 4.10:

$$P_{red} [Pa] = \left[\frac{\beta u_L (E-1) \Delta_a \rho_R^{0,5} A_S}{2^{0,5} A_V C_d \varepsilon_F} \right]^2 \quad (4.10)$$

onde β representa o fator de turbulência (velocidade de queima turbulenta pela velocidade de queima laminar), Δ_a o fator de correção da área da chama (razão entre a área real da chama laminar e a área superficial do vaso) e ε_F é o fator de expansibilidade.

Fakandu *et al.* (2011) utilizaram β e Δ_a igual a um para um vaso de 9,5 L sem obstáculos contendo metano 10%, e obtiveram resultados relativamente próximos aos experimentais e em concordância com os obtidos utilizando a correlação de Bradley e Mitcheson. Mas o fator de correção da área da chama foi ajustado com o intuito de se obter um valor típico de Δ_a .

4.1.3 Modelos que consideram a presença do *vent* e a geometria

Park, Lee e Green desenvolveram um modelo para o cálculo da máxima sobrepressão de uma explosão de metano em uma câmara com *vent* e obstáculos internos (PARK *et al.*, 2008a). Eles se basearam nos dados de Park *et al.* (2008b) de um experimento que foi realizado em câmaras com cinco alturas diferentes, todas com *vent* localizado no topo da câmara, e ignição centralizada no lado oposto ao *vent*. Cada uma das câmaras foi preenchida com três obstáculos alinhados localizados entre o ponto de ignição e o *vent*. Barras cilíndricas, triangulares e quadradas foram os tipos de obstáculos utilizados, e cada tipo apresentava dois tamanhos diferentes, totalizando trinta experimentos.

A partir destes dados experimentais Park *et al.* (2008a) observaram que normalmente ocorreram dois picos de pressão durante a explosão. O primeiro pico foi atribuído à queima do gás localizado entre o ponto de ignição e os obstáculos. No momento em que a pressão de ativação do *vent* é atingida e o diafragma plástico que o cobria começa a se mover para longe do *vent*, a pressão dentro da câmara começa a diminuir devido à saída de gases não queimados pelo *vent*. Como a chama continua a se propagar e interage com os obstáculos no caminho, a sua área superficial aumenta e a pressão começa a subir novamente dando origem a um segundo pico.

Com base nessas observações Park *et al.* (2008a) resolveram dividir a câmara em dois volumes diferentes, um associado ao primeiro pico de pressão (P_{red1}) e outro associado ao segundo (P_{red2}). O primeiro volume está localizado entre a parede do ponto de ignição e os obstáculos, de modo que a área transversal entre os obstáculos e entre os obstáculos e a parede da câmara (A_{V1}) serve como uma espécie de *vent* para o segundo volume. Já o segundo volume está localizado entre o plano que contém A_{V1} e a parede do *vent* real (A_{V2}). A correlação de Cubbage e Simmonds foi modificada para o cálculo dos dois picos considerando os dois volumes de acordo com as Equações 4.11, 4.12, 4.13 e 4.14, e a sobrepressão máxima é dada pela Equação 4.15, onde C_{PLG} é uma função da geometria do problema.

$$P_{red1} = \left(\frac{\bar{A}_1}{\bar{S}_0}\right)^{-1} \quad (4.11)$$

$$\bar{A}_1 = \frac{C_d A_{V1}}{A_{S1}} \quad (4.12)$$

$$P_{red2} = \left(\frac{\bar{A}_2}{\bar{S}_0}\right)^{-1} \left[\frac{P_{red1} + P_a}{P_a}\right] \quad (4.13)$$

$$\bar{A}_2 = \frac{C_d A_{V2}}{A_{S2}} \quad (4.14)$$

$$P_{red} [bar] = P_{red2} C_{PLG} \quad (4.15)$$

Park *et al.* (2008a) propuseram uma correlação para o cálculo de C_{PLG} (Equação 4.16) baseada nos principais parâmetros que influenciam a sobrepressão da explosão, como a razão de bloqueio de volume (VBR), comprimento do percurso da chama (L_f), tamanho do obstáculo (D_o), área transversal da câmara (A_x), comprimento da câmara (L), largura da câmara (D), fator de formato do obstáculo (C_D), velocidade média da chama (\bar{S}_F) e velocidade de queima laminar (u_L).

$$C_{PLG} = \exp \left[a_{PLG} \left(VBR \frac{L_f}{D_o} \right) + b_{PLG} \left(A_x^{0,5} \frac{L}{D} \right) + c_{PLG} \left(C_D \frac{\bar{S}_F}{u_L} \right) + d_{PLG} \right] \quad (4.16)$$

As constantes do modelo (a_{PLG} , b_{PLG} , c_{PLG} e d_{PLG}) foram ajustadas de modo a se obter o menor desvio entre os valores de sobrepressão encontrados através da Equação 4.15 e os valores experimentais de Park *et al.* (2008b). O modelo foi avaliado em outro conjunto de dados experimentais e mostrou boa concordância, porém os dados utilizados foram obtidos em escala laboratorial, o modelo não chegou a ser avaliado com dados em larga escala.

Já Huser, Foyn e Skottene utilizaram no desenvolvimento da correlação tanto dados experimentais quanto de fluidodinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics - CFD*), de explosão de gás natural em larga escala. Cinco dentre os diversos fatores que influenciam a sobrepressão de uma explosão parcialmente confinada foram levados em conta, dentre eles o tamanho da nuvem (volume da nuvem estequiométrica), a obstrução (soma do comprimento de todos os obstáculos sobre o volume total), o confinamento (área do *vent* sobre área superficial total), a distância mínima entre decks ou chapas, e o efeito da presença do canto de um *firewall* (HUSER *et al.*, 2009).

Huser *et al.* (2009) avaliaram cada um dos fatores separadamente, por exemplo, variando o tamanho da nuvem e mantendo os outros quatro fatores constantes para vários tipos de planta de processo, observou-se uma linha de tendência. Essa última foi obtida para os outros parâmetros da mesma maneira, exceto para o fator efeito da presença do canto de um *firewall*. A correlação obtida foi utilizada para calcular a sobrepressão máxima dos mesmos experimentos utilizados no seu desenvolvimento e a maioria dos resultados obtidos estava entre uma faixa de valor duas vezes maior e duas vezes menor que o experimental ou *CFD*. Alguns resultados foram até cinco vezes maiores, isso ocorreu para sobrepressões experimentais ou de *CFD* maiores que 1 bar principalmente devido ao caráter exponencial do modelo. Infelizmente somente a linha de tendência da sobrepressão em função do tamanho da nuvem foi fornecida, a correlação final não foi apresentada no artigo.

4.2 MODELOS FENOMENOLÓGICOS

Segundo Lea e Ledin (2002) modelos fenomenológicos podem ser definidos como modelos físicos simplificados que representam apenas a física essencial de uma explosão. Normalmente a geometria do problema é representada por *grids* ao invés de ser realmente modelada. São modelos com tempo de resposta relativamente curto, e normalmente são utilizados para avaliar vários cenários diferentes ao mesmo tempo de modo a se escolher alguns para serem melhor investigados usando *CFD*.

SCOPE (*Shell Code for Overpressure Prediction in gas Explosions*) é um modelo fenomenológico unidimensional e se baseia numa geometria idealizada de um vaso com *vent* que contém *grids* representando os obstáculos (LEA e LEDIN, 2002). A ignição é central e ocorre no lado oposto ao *vent* (pior caso) e o vaso contém uma mistura homogênea gás-ar. O escoamento através de cada *grid* é utilizado para determinar a turbulência e conseqüentemente a combustão turbulenta após o *grid* (PUTTOCK *et al.*, 2000).

Existem três versões deste modelo, *SCOPE*, *SCOPE 2* e *SCOPE 3*. Este último foi validado por Puttok *et al.* (2000) com dados de 308 experimentos. De acordo com Lea e Ledin (2002) *SCOPE 3* é uma ferramenta rápida, porém não fornece a mesma quantidade de informações que uma simulação de *CFD*.

Já o modelo *CLICHE* (*Confined Linked Chamber Explosion*) se baseia na ideia de que uma planta de processo contém diversas áreas parcialmente confinadas e obstruídas, e, portanto, é razoável modelar cada uma dessas áreas como câmaras separadas que estão ligadas entre si. Ele é capaz de gerar seus dados de entrada a partir de um banco de dados e assim como o *SCOPE* consegue lidar com explosões externas e apresenta tempo de resposta curto, porém a geometria é muito simplificada, e não apresenta muitas informações sobre o campo de escoamento como uma simulação de *CFD* (LEA e LEDIN, 2002).

4.3 MODELOS DE FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Versteeg e Malalasekera (2007) definem *CFD* (fluidodinâmica computacional) como uma técnica de análise de sistemas envolvendo escoamento de fluidos, transferência de calor e fenômenos associados (reações químicas, por exemplo) através de simulação computacional. Os códigos de *CFD* são estruturados em algoritmos numéricos e contém três elementos principais, o pré-processador, o solver e o pós-processador.

Na etapa de pré-processamento os dados de entrada do problema a ser resolvido são fornecidos pelo usuário para o programa e são transformados para um formato apropriado para posterior uso pelo solver. Essa etapa envolve atividades como a definição da geometria do problema, a geração da malha, seleção do fenômeno físico e químico a ser modelado, além da definição das propriedades do fluido e das condições de contorno (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

Na etapa de solver uma técnica de resolução numérica é utilizada para resolução do problema. O método dos volumes finitos é a técnica utilizada por códigos comerciais de *CFD* como o *CFX* e o *FLUENT*, e o algoritmo de resolução consiste em três etapas: integração das equações que governam o escoamento do fluido, com posterior discretização das equações e solução das equações algébricas resultantes por meio de um método iterativo. E finalmente na etapa de pós-processamento os resultados obtidos são apresentados em forma gráfica, ou são exportados para posterior manipulação (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

De acordo com Lea e Ledin (2002) uma das principais vantagens do uso de *CFD* é a grande quantidade de informações sobre o escoamento que pode ser obtida através dele. Além

disso, essa técnica é muito útil quando não existe a possibilidade de realização de um experimento. Porém o seu uso ainda é levemente limitado pelo hardware disponível, e atualmente ainda é difícil simular uma combustão turbulenta em uma geometria muito complexa. Além disso, de acordo com Huser *et al.* (2009), o uso de *CFD* em fases conceituais de projeto pode tomar muito tempo devido ao nível de detalhes requerido para simular uma área de processo, e devido ao tempo de resposta que é maior que o dos outros modelos. Além disso, como nessa fase o design da planta ainda não está totalmente definido, uma simulação em *CFD* pode ser um tanto quanto incerta devido à falta de algumas informações necessárias.

EXSIM, *FLACS*, *AutoReaGas*, são alguns dos códigos de *CFD* apresentados por Lea e Ledin (2002) que são muito utilizados na modelagem de explosões de gás. De acordo com Bjerketvedt *et al.* (1997) a *British Gas* afirmou em seu relatório que o *FLACS* (*Flame Acceleration Simulator*) se destaca por ser o mais desenvolvido e validado na modelagem de explosões em ambientes *offshore*. Inclusive ele foi utilizado no inquérito do acidente da plataforma Piper Alpha, para investigar a sobrepressão que teria sido gerada devido a uma explosão em um de seus módulos (MANNAN, 2012).

O *FLACS* é um software comercial de *CFD* desenvolvido pela *CMR GexCon* para simular tridimensionalmente dispersões e explosões de gás, onde os parâmetros do escoamento são calculados como funções do tempo e do espaço. Ele consegue lidar com geometrias complexas, e leva em conta a interação entre chama, *vent* e obstáculos (BJERKETVEDT *et al.*, 1997).

No *FLACS* a resolução numérica é feita por meio do método dos volumes finitos, utilizando uma malha cartesiana estruturada com volumes de controle de 1 m^3 , e a abordagem da porosidade/resistência distribuída para modelar obstáculos na escala *sub-grid*. A turbulência é modelada com base no conceito *eddy viscosity* através do modelo $k - \epsilon$. A combustão é modelada utilizando o conceito *flamelet*, com um submodelo para a velocidade de queima (função da mistura de gás, temperatura, pressão e turbulência nos reagentes). E, finalmente, a ignição é modelada considerando que 50% do combustível contido no volume de controle em que ocorre a ignição é consumido, dessa forma a temperatura aumenta, dando-se início à explosão (BJERKETVEDT *et al.*, 1997, LEA e LEDIN, 2002 e MANNAN, 2012).

Recentemente o *FLACS* foi utilizado na simulação de explosões de gás natural em larga escala realizadas em duas câmaras iguais interligadas e, com relação à sobrepressão máxima da

explosão, a maioria dos resultados obtidos estava dentro de uma faixa indo de + 50% a - 50% de desvio em relação aos dados experimentais (PEDERSEN, 2013). Estes desvios podem parecer um tanto quanto altos, mas de acordo com Vianna (2009), dados experimentais de pressão máxima da explosão estão sujeitos a incertezas da ordem de 20 a 30%.

5 METODOLOGIA

A formulação do modelo proposto foi desenvolvida com embasamento teórico e a metodologia utilizada para atingir tal fim será apresentada na seção 5.1, juntamente com a formulação obtida.

Porém, alguns parâmetros do modelo precisaram ser definidos antes que ele pudesse ser utilizado. Os parâmetros em questão serão descritos na seção 5.2, juntamente com a metodologia utilizada na sua determinação.

Após a etapa de desenvolvimento da formulação do modelo e definição de seus parâmetros, o desempenho do mesmo foi avaliado. Inicialmente, na etapa de avaliação, foram utilizados dados do experimento em larga escala da *British Gas*, que foi o experimento tido como base para o desenvolvimento do modelo. Em seguida o seu desempenho foi novamente avaliado com dados de outros experimentos em larga escala, com o intuito de validá-lo. E finalmente, sua performance foi comparada com a de outros modelos já existentes. O procedimento realizado nesta etapa de avaliação do modelo será descrito na seção 5.3, onde também serão descritos os experimentos utilizados para este fim.

O modelo proposto e todas as equações associadas a ele, foram implementados no software de planilhas eletrônicas *Microsoft Excel*. O procedimento com as principais etapas de implementação será exposto na seção 5.4.

5.1 DESENVOLVIMENTO DO MODELO

A primeira etapa no desenvolvimento do modelo foi a definição da geometria do problema. Um dos objetivos deste trabalho é que o modelo seja capaz de calcular a sobrepressão de uma explosão de gás que leve em conta a presença de obstáculos em um ambiente parcialmente confinado com *vent*. Portanto, baseando-se no experimento da *British Gas* citado por Arntzen (1998), a geometria escolhida para o modelo em questão é uma câmara com *vent*, já que seu formato se assemelha ao de um módulo *offshore*. Nesta câmara tubos cilíndricos posicionados em seu interior representam as obstruções encontradas no processo (equipamentos e tubulações, por exemplo). A Figura 5.1 apresenta um esquema da câmara em questão, e o experimento da *British Gas* será detalhado na subseção 5.3.1.

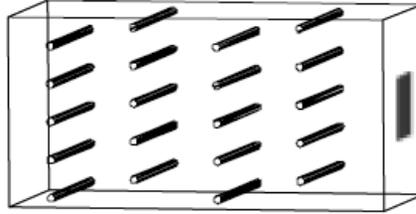


Figura 5.1: Esquema 3D da câmara do experimento da *British Gas*, com o *vent* representado pela área em preto e as obstruções representadas pelos tubos cilíndricos em preto (Fonte: ARNTZEN, 1998).

Outro intuito do trabalho é que o modelo apresente uma abordagem teórica. Para o desenvolvimento do modelo a abordagem citada por Fakandu *et al.* (2011), de que a máxima sobrepressão de uma explosão ocorre quando a máxima vazão mássica de gás não queimado pelo *vent* é igual a máxima taxa de consumo de gás não queimado na frente de chama, foi escolhida. Ela se baseia na taxa de reação química, e desta forma é possível vincular a sobrepressão gerada à turbulência, que atua enrugando a área de chama e aumentando a taxa, de modo que o modelo seja sensível à presença de obstáculos na câmara.

Portanto, considerando que a máxima sobrepressão de uma explosão de gás ocorre quando a máxima vazão mássica de gás não queimado pelo *vent* ($\dot{m}_{v,max}$) é igual a máxima taxa de consumo de gás não queimado na frente de chama ($\dot{m}_{r,max}$), essas duas quantidades precisam ser modeladas. A metodologia utilizada para tal fim será apresentada nas subseções 5.1.1 e 5.1.2, e somente na subseção 5.1.3, o modelo proposto será introduzido.

5.1.1 Modelo para a taxa de descarga

O modelo escolhido para representar a taxa de descarga de gás não queimado pelo *vent* ($\dot{m}_{v,max}$) foi o apresentado por Mannan (2012), que foi obtido por meio do uso da equação da continuidade juntamente com um balaço de energia mecânica assumindo variação de energia potencial desprezível, nenhum trabalho de eixo e expansão isentrópica do gás ideal pelo orifício (CCPS, 2000 e CROWL e LOUVAR, 2009). Ele é dado pela Equação 5.1:

$$\dot{m}_{v,max} = C_d A_V f_V \quad (5.1)$$

onde C_d representa o coeficiente de descarga, A_V a área do *vent* e o termo f_V é uma função do tipo de escoamento, e é dado pela Equação 5.2 quando o escoamento é subsônico ou pela Equação 5.3 quando é sônico:

$$f_V = \left\{ 2P_0 \rho_R \frac{\gamma}{\gamma-1} \left[\left(\frac{P_a}{P_0} \right)^{\frac{2}{\gamma}} - \left(\frac{P_a}{P_0} \right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma}} \right] \right\}^{0,5} \quad (5.2)$$

$$f_V = \left\{ P_0 \rho_R \gamma \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}} \right\}^{0,5} \quad (5.3)$$

onde γ é a razão do calor específico (C_p/C_v), P_a é a pressão atmosférica e P_0 é a pressão dentro da câmara.

Para o caso de uma explosão em que os gases não queimados são liberados pelo *vent* para a atmosfera, o escoamento através do *vent* é considerado sônico quando a razão P_a/P_0 é menor que um valor crítico (η_c) que varia de acordo com o tipo de gás. Este valor pode ser calculado pela Equação 5.4 de acordo com CCPS (2000).

$$\eta_c = \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\gamma/(\gamma-1)} \quad (5.4)$$

5.1.2 Modelo para a taxa de reação química

O modelo escolhido para o cálculo da taxa média de reação química se baseia na formulação BML e utiliza o conceito *flamelet*. Ele foi utilizado por Abu-orf e Cant (2000) para avaliar a combustão pré-misturada turbulenta em um motor de ignição por faísca. O cálculo da taxa média de reação ($\bar{\omega}$) é dado pelo produto entre a taxa média de reação por unidade de área superficial da chama (R) e a razão área superficial da chama por unidade de volume (Σ), e é dada pela Equação 5.5:

$$\bar{\omega} = R\Sigma = \rho_R u_L I_0 \Sigma \quad (5.5)$$

onde I_0 representa o fator de correção de estiramento médio, que leva em conta os efeitos de deformação e curvatura da chama laminar em escoamentos turbulentos (ver subseção 2.4.3). De acordo com Bray (1990) os parâmetros I_0 e Σ estão interligados, já que o aumento da área da

chama é influenciado pela sua propagação e o fator I_0 representa os efeitos de estiramento na velocidade de queima laminar, porém eles podem ser modelados separadamente.

O fator de correção de estiramento médio (I_0) é dado pela Equação 5.6, e representa a razão entre a velocidade média efetiva de queima laminar (chama estirada) pela verdadeira velocidade de queima laminar (chama não estirada). I_0 igual a um indica que a chama não está estirada (BRAY e CANT, 1991).

$$I_0 = \frac{\bar{u}_L}{u_L} \quad (5.6)$$

Bray *et al.* (1989) *apud* Abu-orf e Cant (2000) propôs um modelo algébrico simples para a razão área superficial da chama por unidade de volume (Σ), que é dado pela Equação 5.7:

$$\Sigma = \frac{g\bar{c}(1-\bar{c})}{|\hat{\sigma}_y|\hat{L}_y} \quad (5.7)$$

onde g é uma constante do modelo, \bar{c} é a variável de progresso média, $|\hat{\sigma}_y|$ é o fator de orientação e \hat{L}_y é a escala de comprimento integral do enrugamento. Esse modelo foi obtido a partir da abordagem *flamelet crossing frequency* (Figura 5.2) que propõe que percorrendo o contorno médio da variável de progresso é possível obter um gráfico de onda quadrada de \bar{c} em função da distância (Figura 5.3), já que a chama é muito fina (CANT e MASTORAKOS, 2008).

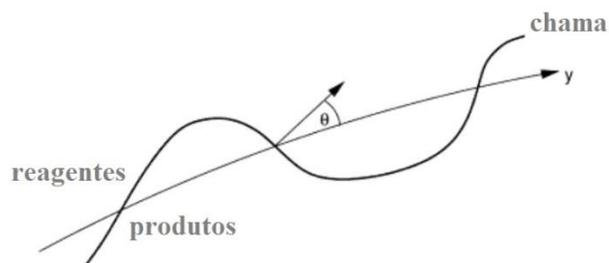


Figura 5.2: Representação gráfica do conceito da abordagem *flamelet crossing frequency* (Adaptado de: CANT e MASTORAKOS, 2008).

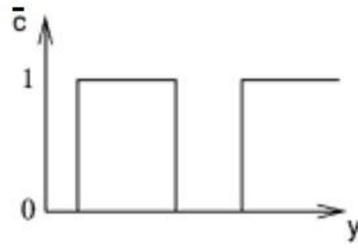


Figura 5.3: Representação da onda quadrada obtida na abordagem *flamelet crossing frequency* (Fonte: CANT e MASTORAKOS, 2008).

A constante g e o fator de orientação $|\hat{\sigma}_y|$ são obtidos por meio de dados experimentais. Já a escala de comprimento integral do enrugamento (\hat{L}_y) pode ser calculada por meio de uma correlação proposta por Abu-orf e Cant (2000), Equação 5.8, que leva em conta a extinção local da chama devido a efeitos de estiramento quando a intensidade turbulenta atinge certo nível:

$$\hat{L}_y = C_L L_L f(u'_{rms}/u_L) \quad (5.8)$$

onde C_L é uma constante, L_L é a escala de comprimento laminar, e $f(u'_{rms}/u_L)$ é uma função empírica que depende da velocidade turbulenta rms (u'_{rms}) e da velocidade de queima laminar (u_L). A escala de comprimento laminar é dada pela Equação 5.9 (ABU-ORF e CANT, 2000).

$$L_L = \nu/u_L \quad (5.9)$$

Abu-orf e Cant (2000) propuseram uma expressão para a função empírica $f(u'_{rms}/u_L)$ que foi obtida através da análise dos dados experimentais de Abdel-Gayed *et al.* (1984), esta expressão é representada pela Equação 5.10, onde C_{w1} e C_{w2} são constantes.

$$f(u'_{rms}/u_L) = \left\{ \left[\frac{1}{1+C_{w1}\frac{u_L}{u'_{rms}}} \right] \left[1 - \exp\left(-\frac{1}{1+C_{w2}\frac{u'_{rms}}{u_L}} \right) \right] \right\}^{-1} \quad (5.10)$$

Tendo como base o conceito *flamelet*, e reunindo as Equações 5.5 a 5.10, a expressão final para o cálculo da taxa de reação química média proposta por Abu-orf e Cant (2000) é dada pela Equação 5.11.

$$\bar{\omega} = \left[\frac{gI_0 \rho_R \bar{c}(1-\bar{c})}{C_L |\bar{\delta}_y|} \right] \left[\frac{u_L^2}{\nu} \right] \left[\frac{1}{1+C_{w1} \frac{u_L}{u'_{rms}}} \right] \left[1 - \exp \left(- \frac{1}{1+C_{w2} \frac{u'_{rms}}{u_L}} \right) \right] \quad (5.11)$$

A taxa de queima na frente de chama ($\dot{m}_{r,max}$) será representada pela Equação 5.12, onde V_f representa o volume da chama.

$$\dot{m}_{r,max} = \left[\frac{gI_0 \rho_R \bar{c}(1-\bar{c})}{C_L |\bar{\delta}_y|} \right] \left[\frac{u_L^2}{\nu} \right] \left[\frac{1}{1+C_{w1} \frac{u_L}{u'_{rms}}} \right] \left[1 - \exp \left(- \frac{1}{1+C_{w2} \frac{u'_{rms}}{u_L}} \right) \right] V_f \quad (5.12)$$

5.1.3 O modelo para cálculo da sobrepressão

Finalmente, reunindo as Equações 5.1, 5.2, 5.3 e 5.12, após manipulação matemática, a expressão final para o cálculo da máxima sobrepressão da explosão foi obtida, Equação 5.13, onde todos os parâmetros estão em unidades do SI:

$$P_0 = \left\{ \frac{\left[\frac{gI_0 \rho_R \bar{c}(1-\bar{c})}{C_L |\bar{\delta}_y|} \right] \left[\frac{u_L^2}{\nu} \right] \left[\frac{1}{1+C_{w1} \frac{u_L}{u'_{rms}}} \right] \left[1 - \exp \left(- \frac{1}{1+C_{w2} \frac{u'_{rms}}{u_L}} \right) \right] V_f}{C_d A_V \Psi_0 \left[\rho_R \gamma \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}} \right]^{0,5}} \right\}^2 \quad (5.13)$$

onde P_0 é a pressão absoluta da explosão e o termo Ψ_0 é calculado pela Equação 5.14 quando o escoamento é subsônico ou é igual a um para escoamento sônico (quando razão P_a/P_0 é menor que o valor crítico dado pela Equação 5.4, o escoamento é sônico).

$$\Psi_0 = \left\{ \frac{2}{\gamma-1} \left(\frac{\gamma+1}{2} \right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}} \left(\frac{P_a}{P_0} \right)^{\frac{2}{\gamma}} \left[1 - \left(\frac{P_a}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right] \right\}^{0,5} \quad (5.14)$$

Para obter a sobrepressão máxima da explosão basta subtrair a pressão atmosférica local da pressão absoluta de acordo com Equação 3.1.

O modelo proposto é diretamente sensível ao efeito da turbulência através do parâmetro u'_{rms} , possui uma abordagem teórica, mas ao mesmo tempo possui uma formulação relativamente simples e pode ser implementado em um código computacional ou até mesmo em uma planilha, ou seja, apresenta um tempo de resposta curto.

O modelo desenvolvido também é sensível ao tipo de combustível, ao tamanho da nuvem, à concentração de combustível na nuvem, ao tamanho do *vent*, e à presença de obstáculos, que são alguns dos principais fatores que influenciam uma deflagração.

Porém nem todos os fatores que influenciam uma deflagração puderam ser levados em consideração na criação do modelo, tais como a localização e a força da fonte de ignição, a localização e o tipo de *vent*, a localização espacial, o formato e o tamanho das obstruções, e, portanto, o modelo não é sensível a alterações em nenhum desses parâmetros.

5.2 PARÂMETROS DO MODELO

Alguns parâmetros do modelo precisaram ser definidos antes da etapa de avaliação. Uns são constantes do próprio modelo BML, que já foram obtidos através da análise de dados experimentais (como a constante g), outros são definidos de acordo com as condições em que a explosão é conduzida (como a área do *vent*, A_V), mas existem outros que ainda precisam ser modelados (como a velocidade turbulenta rms , u'_{rms}).

Os valores das constantes do modelo estão dispostos na Tabela 5.1, juntamente com as referências de onde foram obtidos.

Tabela 5.1: Valores das constantes do modelo proposto e respectivas referências.

Parâmetro do modelo	Símbolo	Valor	Referência
Constante do modelo <i>flamelet</i>	g	2	Bray e Cant (1991)
Fator de correção do estiramento	I_0	1	Abu-orf e Cant (2000)
Constante do modelo <i>flamelet</i>	C_L	1	Abu-orf e Cant (2000)
Fator de orientação	$ \hat{\sigma}_y $	0,5	Bray e Cant (1991)
Constante da função empírica $f(u'_{rms}/u_L)$	C_{w1}	1,5	Abu-orf e Cant (2000)
Constante da função empírica $f(u'_{rms}/u_L)$	C_{w2}	4	Abu-orf e Cant (2000)

Já os parâmetros que são definidos de acordo com as condições em que a explosão é conduzida serão apresentados somente na seção 5.3, juntamente com a descrição dos experimentos.

Finalmente, a velocidade de queima laminar (u_L), o volume da chama (V_f), a variável de progresso média (\bar{c}) e a velocidade turbulenta *rms* (u'_{rms}) são os parâmetros que precisam ser modelados, e a abordagem utilizada para este fim será apresentada nas subseções 5.2.1, 5.2.2, 5.2.3 e 5.2.4, respectivamente.

5.2.1 Velocidade de queima laminar

A velocidade de queima laminar (u_L) é um parâmetro que já foi amplamente estudado em combustão e existem diversas correlações que foram desenvolvidas para o seu cálculo. A correlação proposta por Abu-orf (1996) *apud* Vianna e Cant (2010), Equação 2.7, foi escolhida para ser utilizada no cálculo desta variável, e a Tabela 5.2 traz os valores das constantes da correlação que variam de acordo com o tipo de combustível.

Tabela 5.2: Valores das constantes da equação para o cálculo da velocidade de queima laminar de Abu-orf (1996) *apud* Vianna (2009).

Combustível	a_{AO}	b_{AO}	c_{AO}	d_{AO}	α_{AO}	β_{AO}
Metano	0,6097	-2,554	7,3105	1,2303	2,0	-0,42
Propano	0,4243	0,7345	4,5003	0,9813	1,77	-0,25

5.2.2 Volume da chama

Para modelar o parâmetro volume da chama (V_f), foram feitas algumas suposições. Nos casos de explosão que serão analisados, a ignição ocorre na parede oposta ao *vent* numa posição central, em um compartimento alongado (com comprimento maior que altura e largura), completamente preenchido com a mistura ar e combustível (razão V_C/V igual a 1, onde V_C é o volume da nuvem inflamável e V é o volume da câmara). De acordo com Bjerketvedt *et al.* (1997), em um módulo deste tipo a chama se propaga no modo planar na maior parte do compartimento. Portanto, supondo que a chama se propaga no modo planar, considerou-se que ela estará contida em uma região delimitada por dois planos transversais separados por uma distância igual à espessura da chama (δ), de acordo com a Figura 5.4.

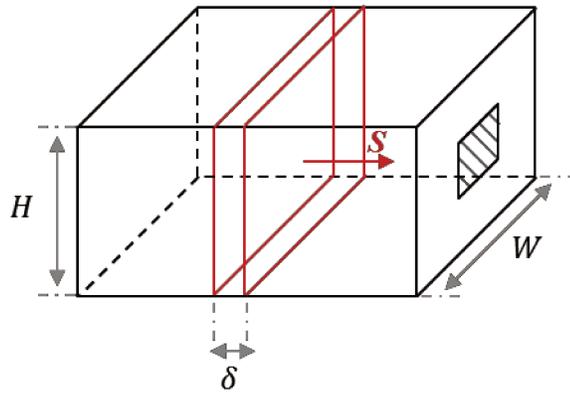


Figura 5.4: Esquema representando a câmara em que ocorre a explosão, destaque para a região delimitada pelos planos em vermelho que corresponde à região ocupada pela chama planar. A espessura da chama (δ) foi representada fora de escala com o intuito de facilitar a sua visualização.

Levando em conta essa consideração, o volume da chama é dado pela Equação 5.15, onde H é a altura da câmara e W a sua largura.

$$V_f = \delta HW \quad (5.15)$$

Contudo a espessura da chama precisa ser determinada. Não existe um consenso quanto à melhor forma de estimar esta variável, já que na prática existem muitas definições para a mesma e, portanto, torna-se difícil determinar este parâmetro com precisão (subseção 2.2.3). Sabe-se que a espessura da chama, considerando as suas três zonas juntas (pré-aquecimento, reação e equilíbrio) é da ordem de alguns milímetros para a maioria dos hidrocarbonetos (CANT e MASTORAKOS, 2008). Considerando os experimentos de Andrews e Bradley (1972b) para a mistura metano e ar (gráfico da Figura 2.5), a espessura da chama de uma mistura estequiométrica (razão de equivalência igual a 1) é em torno de 1 mm, portanto esse foi o valor considerado para esta variável.

Para um caso de explosão em que a câmara não está completamente cheia com a mistura ar e combustível inflamável, ou seja, para um caso com V_c/V menor que um, o volume da chama passa a ser calculado através da Equação 5.16, onde foi considerado que a variação de volume não altera a espessura da chama (δ).

$$V_f = \delta HW \left(\frac{V_c}{V} \right)^{2/3} \quad (5.16)$$

5.2.3 Variável de progresso média

A variável de progresso média (\bar{c}) faz parte da modelagem BML, que foi desenvolvida para ser utilizada em códigos de *CFD*. Nas simulações, uma equação de balanço da variável de progresso média é resolvida ao longo do tempo e do espaço. O modelo proposto tem por objetivo calcular a máxima sobrepressão gerada dentro da câmara, não faz parte do seu escopo saber a localização nem o tempo em que essa máxima sobrepressão ocorre. Portanto torna-se necessário modelar esta variável de uma forma mais simplificada, assegurando o tempo de resposta curto do modelo proposto.

Sabe-se que \bar{c} assume valor zero nos reagentes e um nos produtos, e que onde a chama está presente, ou seja, onde há reação química, essa variável assume valores intermediários (CANT e BRAY, 1988). De acordo com a abordagem teórica utilizada no desenvolvimento do modelo proposto, deseja-se calcular a máxima taxa de consumo de gás não queimado na frente de chama, e, portanto, \bar{c} deve assumir um valor entre zero e um. A máxima taxa ocorre quando a chama apresenta a maior área possível, e a variável razão área superficial da chama por unidade de volume (Σ) representa a área da chama nessa modelagem. Σ é função de \bar{c} (Equação 5.7), e essa função assume valor máximo em \bar{c} igual a 0,5, portanto este foi o valor utilizado para esta variável.

5.2.4 Velocidade turbulenta *rms*

A variável velocidade turbulenta *rms* (u'_{rms}) está presente na modelagem BML, que foi desenvolvida para ser utilizada em códigos de *CFD*. Este parâmetro está diretamente ligado à modelagem da turbulência, que, para o caso do modelo $k - \varepsilon$, envolve a resolução de duas equações de transporte adicionais. Mais uma vez, um dos escopos deste trabalho é desenvolver um modelo com tempo de resposta curto, portanto seria interessante modelar este parâmetro através de uma abordagem não tão complexa.

Na cascata de energia da turbulência descrita por Richardson, a energia cinética dos turbilhões é transferida através das diferentes escalas de tamanho (das maiores para menores), até ser dissipada como calor pela viscosidade nas menores escalas. Nela os turbilhões maiores

possuem uma escala de velocidade (u_0) que é da ordem da velocidade turbulenta *rms* (u'_{rms}), e essa última está relacionada com a energia cinética turbulenta (k) através da Equação 2.17, que por sua vez, foi obtida a partir da equação que define k (Equação 2.15), considerando turbulência isotrópica. Portanto, k e u'_{rms} estão relacionados através da Equação 2.17, e consequentemente obtendo-se valores de k , seria possível calcular u'_{rms} através dessa equação.

A questão agora seria como calcular k através de uma abordagem prática. A presença de obstáculos na câmara gera turbulência no escoamento, que por sua vez atua enrugando a área da chama, aumentando a taxa de reação e consequentemente a sobrepressão gerada, logo a energia cinética turbulenta (k) está de certa forma relacionada ao grau de obstrução, que é representado pela variável razão de bloqueio de volume (VBR). Uma possível maneira de relacionar essas duas variáveis seria através do desenvolvimento de uma correlação entre elas. Os dados necessários para a criação da correlação poderiam ser obtidos através de simulações de fluidodinâmica computacional (*CFD*) da explosão de gás na câmara para vários valores de VBR diferentes (variando o número de tubos dentro da câmara). Com os resultados das simulações em termos de k máximo, a correlação em questão seria obtida, para posteriormente ser utilizada para calcular k para uma dada VBR , e com o valor estimado de k máximo, seria possível calcular u'_{rms} através da Equação 2.17.

Um dos *softwares* de *CFD* mais utilizados para a modelagem de explosões de gás é o *FLACS* da *GexCon*. Como não existe licença de uso do mesmo disponível na UNICAMP, e é um software extremamente caro, para viabilizar o desenvolvimento do trabalho foi feita uma parceria com uma empresa da área de Análise de Riscos, a *DNV GL*. De acordo com essa parceria a empresa ficou responsável por simular casos de explosões de gás pré-determinados (casos da Tabela 5.3) utilizando o *FLACS* com o intuito de disponibilizar os resultados obtidos para possibilitar o desenvolvimento da correlação em questão. Em contrapartida, a empresa teria acesso à planilha para a estimativa da sobrepressão máxima da explosão de gás com o modelo proposto implementado.

As simulações no *FLACS* foram feitas de modo a reproduzir as explosões do experimento da *British Gas*. A subseção 5.3.1 apresenta mais detalhes sobre este experimento. Porém, além das geometrias utilizadas pela *British Gas* (câmara vazia, com vinte e com quarenta tubos), foram propostas mais dez, totalizando treze arranjos simulados. A escolha da configuração desses dez

arranjos foi feita com base nas geometrias da *British Gas*. Observando a alocação espacial dos tubos desse experimento, é possível perceber que o número de tubos por coluna se repete (igual a cinco), e o número de colunas varia (de quatro para oito). Com base nessa observação, foram propostos arranjos variando o número de colunas (NC) e o número de tubos por coluna (NT), e os valores de NC e NT foram escolhidos de modo a se obter valores de VBR próximos aos do experimento (0, 1,3 e 2,5%).

Ainda nesse experimento, a localização espacial dos tubos na câmara apresenta um padrão. A primeira coluna (à esquerda, próxima ao ponto de ignição) começa com um tubo ao nível do chão, a segunda coluna, com tubo ao nível do teto, e assim sucessivamente, de modo que um tubo da coluna n esteja localizado exatamente no meio em relação aos dois tubos mais próximos da coluna $n-1$ (ver Figura 5.1). Esse padrão foi mantido nas simulações, e para localizar espacialmente os tubos dos arranjos foram criadas três variáveis, EH (espaçamento horizontal entre tubos e entre tubo e parede), EV (espaçamento vertical entre tubos) e EV' (espaçamento vertical entre tubo e parede), que variam de acordo com o número de colunas (NC) e o número de tubos por coluna (NT) do arranjo. A Figura 5.5 apresenta uma vista da parede posterior da câmara para o arranjo contendo vinte tubos, indicando como essas variáveis determinam a localização espacial dos tubos na câmara. E as Equações 5.17, 5.18 e 5.19 podem ser utilizadas no cálculo dos valores de EH , EV e EV' (em metros) para cada um dos arranjos.

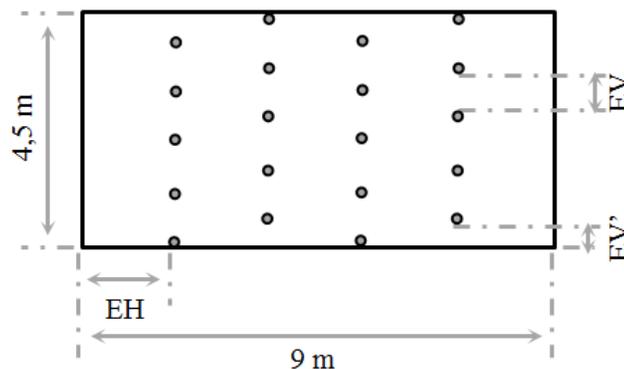


Figura 5.5: Esquema da alocação de tubos para o arranjo de vinte tubos com NC igual a 4 e NT igual a 5, vista lateral da câmara.

$$EV = \frac{4,5 - 0,18(NT + 0,5)}{(NT - 0,5)} \quad (5.17)$$

$$EV' = \frac{4,32}{(2NT-1)} \quad (5.18)$$

$$EH = \frac{9-0,18NC}{(NC+1)} \quad (5.19)$$

A Tabela 5.3 apresenta os dez arranjos que foram propostos junto com os três da *British Gas*, totalizando treze arranjos que foram simulados no *FLACS*. A tabela expõe os arranjos ordenados pelo número de colunas (NC), juntamente com os valores calculados de N_t (número de tubos total), VBR , EV , EV' e EH . Para o caso da câmara da *British Gas*, que possui tubos cilíndricos e horizontais, a razão de bloqueio do volume (VBR) é calculada pela Equação 5.20. Para uma câmara com tubos cilíndricos e verticais, a Equação 5.21 é utilizada. Onde D_t é o diâmetro do tubo, L é o comprimento da câmara, H a sua altura e W a sua largura.

$$VBR = \frac{N_t \pi (D_t/2)^2}{LH} \quad (5.20)$$

$$VBR = \frac{N_t \pi (D_t/2)^2}{LW} \quad (5.21)$$

Tabela 5.3: Valores de NC e NT adotados e valores calculados de N_t , VBR , EH , EV e EV' , de acordo com o número do arranjo. Arranjos de número 1, 3 e 11 representam os três do experimento da *British Gas*.

Arranjo nº	NC	NT	N_t	VBR (%)	EH (m)	EV (m)	EV' (m)
1	0	0	0	0	-	-	-
2	4	4	16	1	1,66	1,05	0,62
3	4	5	20	1,3	1,66	0,78	0,48
4	4	6	24	1,5	1,66	0,61	0,39
5	4	7	28	1,8	1,66	0,48	0,33
6	6	4	24	1,5	1,13	1,05	0,62
7	6	5	30	1,9	1,13	0,78	0,48
8	6	6	36	2,3	1,13	0,61	0,39
9	6	7	42	2,6	1,13	0,48	0,33
10	8	4	32	2	0,84	1,05	0,62
11	8	5	40	2,5	0,84	0,78	0,48
12	8	6	48	3	0,84	0,61	0,39
13	8	7	56	3,5	0,84	0,48	0,33

Para obtenção dos resultados de interesse, foram distribuídos 128 pontos de monitoramento dentro da câmara, uma combinação entre os valores x igual a 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 e 8

m, y igual a 0,5, 1,5, 2,5 e 3,5 m e z igual a 0,5, 1,5, 2,5 e 3,5 m. Os pontos de monitoramento funcionam da seguinte maneira, nestes pontos fixos no espaço o simulador observa os valores das variáveis de interesse ao longo do tempo, e no final fornece os valores máximos que essas variáveis atingiram ao longo de toda a simulação em função do ponto monitorado.

Como o propósito do modelo desenvolvido é obter a máxima sobrepressão da explosão de gás dentro da câmara, a máxima energia cinética turbulenta (k) é uma variável de interesse. Além disso, valores de máxima sobrepressão da explosão de gás (P_{red}) e da máxima taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ε) também foram obtidos das simulações através dos pontos de monitoramento.

Após os resultados das simulações terem sido obtidos, os dados de k em função de VBR foram transferidos para uma planilha do *Microsoft Excel*, e uma curva foi ajustada aos dados, por meio de regressão. O *Excel* utiliza o método dos mínimos quadrados para encontrar o melhor ajuste e disponibiliza os seguintes tipos de regressão: exponencial, linear, logarítmica, polinomial, potência e média móvel, e o melhor tipo de regressão foi escolhido com base nos resultados. O parâmetro R^2 , conhecido como coeficiente de determinação, é calculado automaticamente pelo *Excel* (Equação 5.22), e representa quão precisos são os resultados obtidos com a curva ajustada em relação aos dados utilizados na sua obtenção. O valor de R^2 varia de zero a um, e quanto mais próximo de um, mais precisa é a curva obtida (OFFICE, 2014a e 2014b).

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i \text{ dados} - y_i \text{ curva})^2}{(\sum_{i=1}^n y_i \text{ dados}^2) - \frac{(\sum_{i=1}^n y_i \text{ dados})^2}{n}} \quad (5.22)$$

onde n representa o número de pontos utilizados na obtenção da curva, $y_i \text{ curva}$ representa o valor da variável dependente calculado (valor estimado) e $y_i \text{ dados}$ o valor da variável dependente utilizado na obtenção da curva (valor observado).

5.3 AVALIAÇÃO DO MODELO

Após a etapa de definição dos parâmetros de entrada do modelo proposto, o desempenho do mesmo em relação à estimativa da máxima sobrepressão da explosão (P_{red}) foi avaliado em

diferentes experimentos em larga escala. Os desvios dos resultados do modelo (P_{red}) em relação aos dados experimentais ($P_{red\ exp}$) foram calculados através da Equação 5.23.

$$Desvio(\%) = \frac{P_{red} - P_{red\ exp}}{P_{red\ exp}} \times 100 \quad (5.23)$$

O primeiro experimento utilizado na avaliação de desempenho do modelo foi o da *British Gas*. A subseção 5.3.1 traz a descrição desse experimento, além dos dados de entrada do modelo para esse caso. Além disso, outros conjuntos de dados experimentais em larga escala foram utilizados, como o experimento da *Shell* intitulado *SOLVEX (Shell Offshore Large Vented Explosion)* e o experimento da *DNV*, que serão detalhados nas subseções 5.3.2 e 5.3.3.

Além disso, o comportamento do modelo com relação a alterações em variáveis de entrada também foi avaliado, somente com o intuito de verificar se o modelo está apresentando o tipo de resposta esperado, já que não foram encontrados dados experimentais para comparação. Os parâmetros grau de preenchimento da câmara (V_C/V) e área transversal ocupada pelo vent (A_V/A_W) foram os parâmetros escolhidos para essa avaliação.

E ainda, para verificar se o modelo realmente se encontra no regime *flamelet*, foi necessário estimar os números de Reynolds turbulento (Equação 2.35), Damköhler (Equação 2.36) e Karlovitz (Equação 2.38). Esses números adimensionais são funções da velocidade de queima laminar (u_L), da espessura da chama laminar (δ_L), da velocidade turbulenta *rms* (u'_{rms}) e da escala de comprimento dos turbilhões maiores (l_0). A velocidade de queima laminar foi estimada pela correlação de Abu-orf (1996) *apud* Vianna e Cant (2010), como descrito na subseção 5.2.1. A espessura da chama laminar foi estimada através da Equação 2.9. A velocidade turbulenta *rms* (u'_{rms}) foi estimada de acordo com a subseção 5.2.4. Já a escala de tamanho dos turbilhões maiores (l_0) é função da energia cinética turbulenta (k) e da sua taxa de dissipação (ε), de acordo com a Equação 2.21. O cálculo do primeiro já foi abordado na subseção 5.2.4, mas ε precisa ser modelado. Como esses dois parâmetros estão diretamente relacionados, a mesma abordagem que foi utilizada para obter k , foi utilizada para obter ε , ou seja, foi desenvolvida uma correlação de ε em função de VBR a partir dos dados das simulações do *FLACS* (subseção 5.2.4).

Além disso, alguns parâmetros do modelo, tais como a constante g , o fator de orientação $|\hat{\sigma}_y|$ e a espessura da chama (δ) podem ser considerados incertezas do modelo, e seus valores foram variados dentro de uma faixa aceitável, com o intuito de se avaliar a influência que os mesmos podem exercer nos resultados.

5.3.1 O experimento da *British Gas*

O experimento de explosão de gás em larga escala da *British Gas* citado por Arntzen (1998) foi escolhido para ser utilizado na etapa de avaliação inicial, já que o modelo foi desenvolvido com base na geometria desse experimento.

Ele foi realizado com uma mistura estequiométrica de ar e gás natural, em um compartimento de 4,5 m de altura, 4,5 m de largura e 9 m de comprimento, com uma área de *vent* de 2,25 m². O ponto de ignição está localizado no lado oposto ao *vent*, numa posição central (ARNTZEN, 1998). A Figura 5.6 apresenta um esquema com as principais dimensões do compartimento em questão.

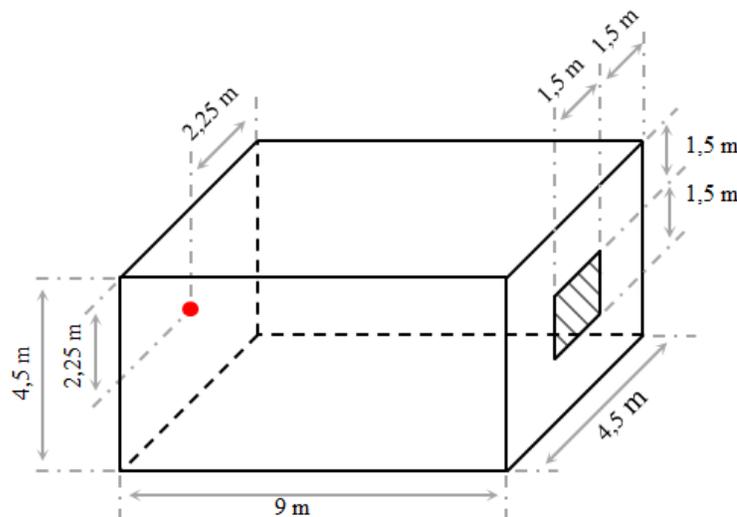


Figura 5.6: Esquema com as principais dimensões da câmara do experimento da *British Gas*. A área hachurada representa o *vent*, e o ponto na parede oposta ao *vent* representa o ponto de ignição.

Nesse experimento a sobrepressão máxima foi obtida para a câmara vazia e para a câmara com 20 e 40 tubos cilíndricos de 0,18 m de diâmetro representando os obstáculos (ARNTZEN,

1998). A Figura 5.7 mostra como os tubos foram alocados espacialmente dentro do compartimento para os dois casos com tubos e a Tabela 5.4 apresenta os principais resultados que foram obtidos neste experimento.

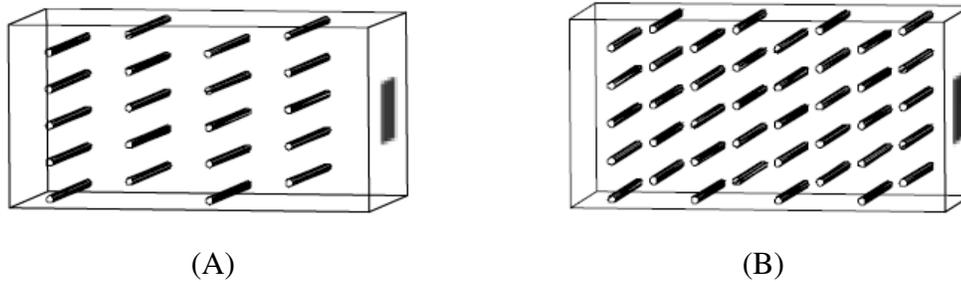


Figura 5.7: Esquema 3D representando a localização espacial das obstruções na câmara do experimento da *British Gas* para os arranjos de 20 (A) e 40 (B) tubos (Fonte: ARNTZEN, 1998).

Tabela 5.4: Resultados experimentais obtidos pela *British Gas* (Fonte: ARNTZEN, 1998).

Número de tubos	Máxima sobrepressão (bar)
0	0,4
20	2,3
40	3,1

A Tabela 5.5 apresenta os valores dos dados de entrada do modelo que foram estimados considerando gás natural contendo 90% de metano e 10% de propano em volume, e ar contendo 79% de nitrogênio e 21% de oxigênio em volume, a 25°C e 1 atm. E a Tabela 5.6 apresenta os valores dos principais dados de entrada do modelo proposto que dependem do experimento analisado.

Tabela 5.5: Dados de entrada do modelo estimados para mistura ar e gás natural estequiométrica do experimento da *British Gas*.

Variável	Valor	Unidade
ρ_R	1,14	kg/m ³
ν	$1,46 \times 10^{-5}$	m ² /s
γ	1,391	-

Tabela 5.6: Dados de entrada do modelo proposto específicos para o experimento da *British Gas*.

Variável	Valor	Unidade
W	4,5	m
H	4,5	m
L	9	m
D_t	0,18	m
N_t	0, 20 e 40	-
A_V	2,25	m ²
C_d	0,61	-
Φ	1	kg/kg
P_a	1,01325	bar

5.3.2 O experimento *SOLVEX*

No experimento *SOLVEX* da *Shell* citado por Arntzen (1998) a geometria utilizada é similar a da *British Gas*, uma câmara com *vent* com tubos representando as obstruções do processo, uma das principais diferenças é que os tubos estão na vertical ao invés de na horizontal. Esse experimento foi realizado tanto em pequena quanto em larga escala, mas somente o caso em larga escala será descrito. A câmara para o experimento em larga escala possui 10 m de comprimento, 8,75 m de largura e 6,25 m de altura, com tubos de 0,5 m de diâmetro. A ignição é central e ocorreu do lado oposto ao *vent*, e esse último ocupa 50% da área da parede. Misturas de ar e metano e ar e propano, ambas estequiométricas, foram utilizadas nesse experimento (ARNTZEN, 1998 e VIANNA, 2009). A Figura 5.8 apresenta um esquema com as principais dimensões do compartimento em questão.

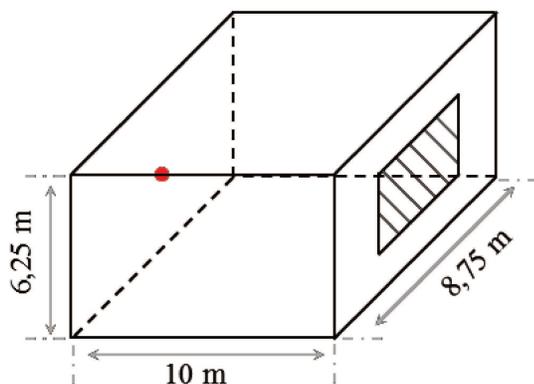


Figura 5.8: Esquema com as principais dimensões da câmara do experimento *SOLVEX*. A área hachurada representa o *vent*, e o ponto na parede oposta ao *vent* representa o ponto de ignição.

Nesse experimento, a sobrepressão máxima da explosão foi obtida para a câmara sem tubos, para a câmara com uma fileira contendo 7 tubos alinhados mais próximos ao *vent*, com uma fileira contendo 7 tubos alinhados mais próximos ao ponto de ignição e com as duas fileiras juntas (ARNTZEN, 1998). A Figura 5.9 apresenta um esquema de como os tubos foram alocados espacialmente para o caso com 14 tubos e a Tabela 5.7 apresenta os principais resultados obtidos neste experimento.

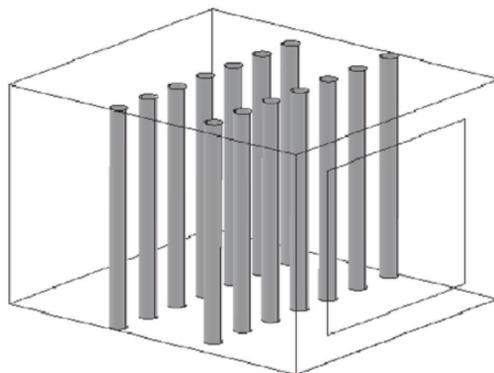


Figura 5.9: Esquema da geometria do experimento *SOLVEX* para o caso com 14 tubos (Fonte: Vianna, 2009).

Tabela 5.7: Resultados experimentais obtidos pela *Shell* (Fonte: ARNTZEN, 1998).

Número de tubos	Posição dos tubos	Máxima sobrepressão para a mistura ar e metano (bar)	Máxima sobrepressão para a mistura ar e propano (bar)
0	-	0,048	0,111
7	Próximos ao <i>vent</i>	0,104	0,150
7	Próximos ao ponto de ignição	0,130	0,189
14	-	0,180	0,290

Como o modelo desenvolvido não é sensível à localização espacial dos tubos, para comparar os resultados do modelo para o caso contendo 7 tubos com os dados experimentais, foi feita a média entre os dois valores experimentais contendo 7 tubos. Portanto, os valores de sobrepressão utilizados na comparação para as misturas ar e metano e ar e propano foram 0,117 e 0,170 bar, respectivamente.

A Tabela 5.8 exibe os valores dos dados de entrada do modelo que foram estimados para a mistura ar e metano estequiométrica (9,5% de metano em volume), e para a mistura ar e propano estequiométrica (4% de propano em volume). As estimativas foram feitas considerando ar contendo 79% de nitrogênio e 21% de oxigênio em volume, a 25°C e 1 atm. Já a Tabela 5.9 apresenta os valores dos principais dados de entrada do modelo proposto utilizados para o experimento *SOLVEX*.

Tabela 5.8: Dados de entrada do modelo estimados para mistura ar e metano e ar e propano estequiométricas do experimento *SOLVEX*.

Variável	Mistura ar e metano	Mistura ar e propano	Unidade
ρ_R	1,13	1,21	kg/m ³
ν	$1,46 \times 10^{-5}$	$1,41 \times 10^{-5}$	m ² /s
γ	1,391	1,390	-

Tabela 5.9: Dados de entrada do modelo proposto específicos para o experimento *SOLVEX*.

Variável	Valor	Unidade
W	8,75	m
H	6,25	m
L	10	m
D_t	0,5	m
N_t	0, 7 e 14	-
A_V	27,34	m ²
C_d	0,61	-
Φ	1	kg/kg
P_a	1,01325	bar

5.3.3 O experimento da *DNV*

No experimento da *DNV* citado por Cates e Samuels (1991), a geometria utilizada também é similar a da *British Gas*, uma câmara com *vent* onde as obstruções do processo são representadas por tubos. A câmara possui 4 m de comprimento, 2,5 m de largura e 3,5 m de altura, com tubos de 0,11 m de diâmetro. A ignição da mistura de ar e propano rica ($\Phi = 1,3$) é central e ocorreu do lado oposto ao *vent*. Esse último ocupa 100% da área da parede lateral (CATES e SAMUELS, 1991 e VIANNA, 2009). As principais dimensões do compartimento em questão podem ser visualizadas na Figura 5.10.

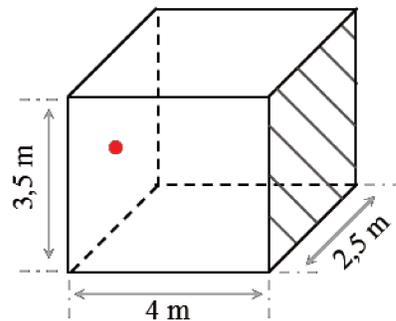


Figura 5.10: Esquema com as principais dimensões da câmara do experimento da *DNV*. A área hachurada representa o *vent*, e o ponto na parede oposta ao *vent* representa o ponto de ignição.

Apenas alguns pontos experimentais foram selecionados, já que o experimento avaliou o efeito da posição da coluna de tubos na sobrepressão, e também o efeito do formato dos obstáculos, e o modelo proposto não é sensível a nenhum desses parâmetros. A sobrepressão máxima da explosão foi obtida para a câmara sem tubos, câmara com uma coluna (localizada a 2,2 m do *vent*), com duas colunas (posicionadas a 0,6 e 2,2 m do *vent*) e com quatro colunas (localizadas a 0,6, 1,14, 1,69 e 2,2 m do *vent*), e cada coluna contém 14 tubos (CATES e SAMUELS, 1991 e VIANNA, 2009). A Figura 5.11 apresenta um esquema de como os tubos foram alocados espacialmente para o caso com quatro colunas e a Tabela 5.10 apresenta os principais resultados obtidos neste experimento.

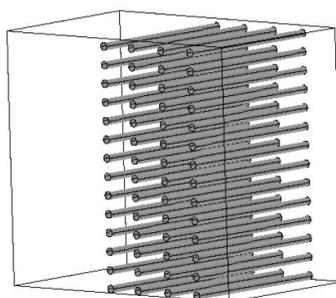


Figura 5.11: Esquema da geometria do experimento da *DNV* para o caso com 4 colunas de tubos (Fonte: Vianna, 2009).

Tabela 5.10: Resultados experimentais obtidos pela *DNV* (Fonte: CATES e SAMUELS, 1991).

Número de tubos	Posição dos tubos	Máxima sobrepressão (bar)
0	-	0,013
14	2,2 m do <i>vent</i>	0,030
28	0,6 e 2,2 m do <i>vent</i>	0,206
56	0,6, 1,14, 1,69 e 2,2 m do <i>vent</i>	0,352

Os valores dos principais dados de entrada do modelo proposto utilizados para o experimento da *DNV* estão contidos na Tabela 5.11. Enquanto a Tabela 5.12 exhibe os valores dos dados de entrada do modelo que foram estimados para a mistura ar e propano com razão de

equivalência (Φ) igual a 1,3 (5,1% de propano em volume). As estimativas foram feitas considerando ar contendo 79% de nitrogênio e 21% de oxigênio em volume, a 25°C e 1 atm.

Tabela 5.11: Dados de entrada do modelo proposto específicos para o experimento da *DNV*.

Variável	Valor	Unidade
W	2,5	m
H	3,5	m
L	4	m
D_t	0,11	m
N_t	0, 14, 28 e 56	-
A_V	8,77	m ²
C_d	0,61	-
Φ	1,3	kg/kg
P_a	1,01325	bar

Tabela 5.12: Dados de entrada do modelo estimados para mistura ar e propano ($\Phi = 1,3$) do experimento da *DNV*.

Variável	Valor	Unidade
ρ_R	1,21	kg/m ³
ν	$1,40 \times 10^{-5}$	m ² /s
γ	1,387	-

5.3.4 Comparação com outros modelos

Os resultados obtidos com o modelo desenvolvido foram comparados com os resultados obtidos com alguns dos modelos empíricos e semi-empíricos que foram descritos na seção 4.1. A grande maioria desses modelos não é sensível à presença de obstáculos, e, portanto, apenas a sobrepressão máxima para a câmara sem tubos foi calculada para efeito de comparação. A Tabela 5.13 apresenta os dados de entrada que são específicos para os modelos em questão.

Tabela 5.13: Dados de entrada específicos para os modelos que foram utilizados na etapa de comparação.

Variável	Valor	Unidade	Referência
$C_{NFPA\ metano}$	0,037	bar ^{1/2}	Razus e Krause (2001)
$C_{NFPA\ propano}$	0,045	bar ^{1/2}	Razus e Krause (2001)
E_{metano}	7,5	-	Towler e Sinnott (2013)
$E_{propano}$	7,9	-	Towler e Sinnott (2013)
χ	4	-	Razus e Krause (2001)
β	1	-	Fakandu <i>et al.</i> (2011)
Δ_a	1	-	Fakandu <i>et al.</i> (2011)
ε_F	1	-	Fakandu <i>et al.</i> (2011)
η_{TNT}	5	%	CCPS (2000)
E_{TNT}	4.437	kJ/kg	CCPS (2000)
$E_C\ metano$	890,3	kJ/mol	Crowl e Louvar (2009)
$E_C\ propano$	2.219,9	kJ/mol	Crowl e Louvar (2009)
Força da explosão	7	-	CCPS (2000)

5.4 IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO

A equação do modelo (Equação 5.13) e as equações associadas a ela foram implementadas em uma planilha do *Microsoft Excel* 2010, e os principais passos realizados na elaboração da planilha são descritos a seguir.

A máxima pressão da explosão (P_0) é função de ψ_0 , que por sua vez é função do tipo de escoamento, e, portanto, a função “SE” do *Excel* foi utilizada para o cálculo de ψ_0 . Essa função realiza um teste lógico (nesse caso se P_a/P_0 é maior ou igual a η_c), e de acordo com o resultado do teste (verdadeiro ou falso) ela calcula o valor da célula. Para o caso em questão ψ_0 igual a Equação 5.14 para verdadeiro ou ψ_0 igual a 1 para falso.

Entretanto a razão P_a/P_0 é função da variável de interesse (P_0), dessa forma é necessário fazer uma estimativa inicial de P_0 para poder calcular ψ_0 e só então conseguir calcular P_0 pela Equação 5.13. O valor de P_0 inicial ($P_0\ inicial$) deve ser igual ao de P_0 calculado ($P_0\ calc$) para que o resultado final do modelo seja obtido, portanto a ferramenta *Solver* do *Excel* foi utilizada para

atingir este objetivo. *Solver* é uma ferramenta de teste de hipóteses que encontra o valor ideal de uma célula de destino (no caso a célula $P_{0\text{ inicial}} - P_{0\text{ calc}}$ ser igual a zero) variando o valor da célula usada para calcular a célula de destino (no caso variando $P_{0\text{ inicial}}$). Este teste pode estar sujeito a restrições. Para o caso em questão, a restrição utilizada foi $P_{0\text{ calc}}$ maior ou igual a P_a , já que a pressão dentro da câmara antes da explosão ocorrer é igual a pressão atmosférica, e portanto, a pressão máxima da explosão não pode assumir um valor menor que P_a . O método de resolução do *Solver* escolhido foi o GRG (Gradação Reduzida Generalizada) não linear, já que é adequado para problemas não lineares.

Macros, que são conjuntos de instruções em *VBA* (*Visual Basic for Applications*), foram criadas para automatizar o uso da ferramenta *Solver* na planilha, já que, se qualquer mudança fosse feita em uma variável de entrada da planilha sem *Macros*, seria necessário executar várias vezes a ferramenta *Solver* manualmente, de linha em linha, toda vez que uma mudança fosse feita. Foram criadas oito *Macros* desse tipo, que diferem entre si apenas pelo número de linhas em que o *Solver* é executado. O menor código em *VBA* criado executa o *Solver* em apenas três linhas e o maior em vinte linhas. Todas essas *Macros* foram inseridas nos ícones da planilha intitulados “Calcular sobrepressão”, e, portanto, clicando nesses botões elas são executadas. A Figura 5.12 apresenta o *screenshot* do código em *VBA* da menor *Macro*, que executa o *Solver* em apenas três linhas.

Além disso, também foram criadas *Macros* que fazem com que os valores de $P_{0\text{ inicial}}$ retornem ao valor inicial adotado ($P_{0\text{ inicial}} = 1,01326$ bar), uma vez que é necessário realizar essa alteração antes de efetuar o cálculo da sobrepressão, toda vez que for necessário recalculá-la. Também foram criadas oito *Macros* desse tipo, e essa alteração é executada em apenas três linhas no caso do menor código em *VBA* e em vinte linhas no caso do maior código. As mesmas foram inseridas nos ícones da planilha intitulados “Reset”, e dessa forma, clicando nesses botões essas *Macros* são executadas. A Figura 5.13 apresenta o *screenshot* do código em *VBA* da menor *Macro*, que executa a alteração em apenas três linhas.

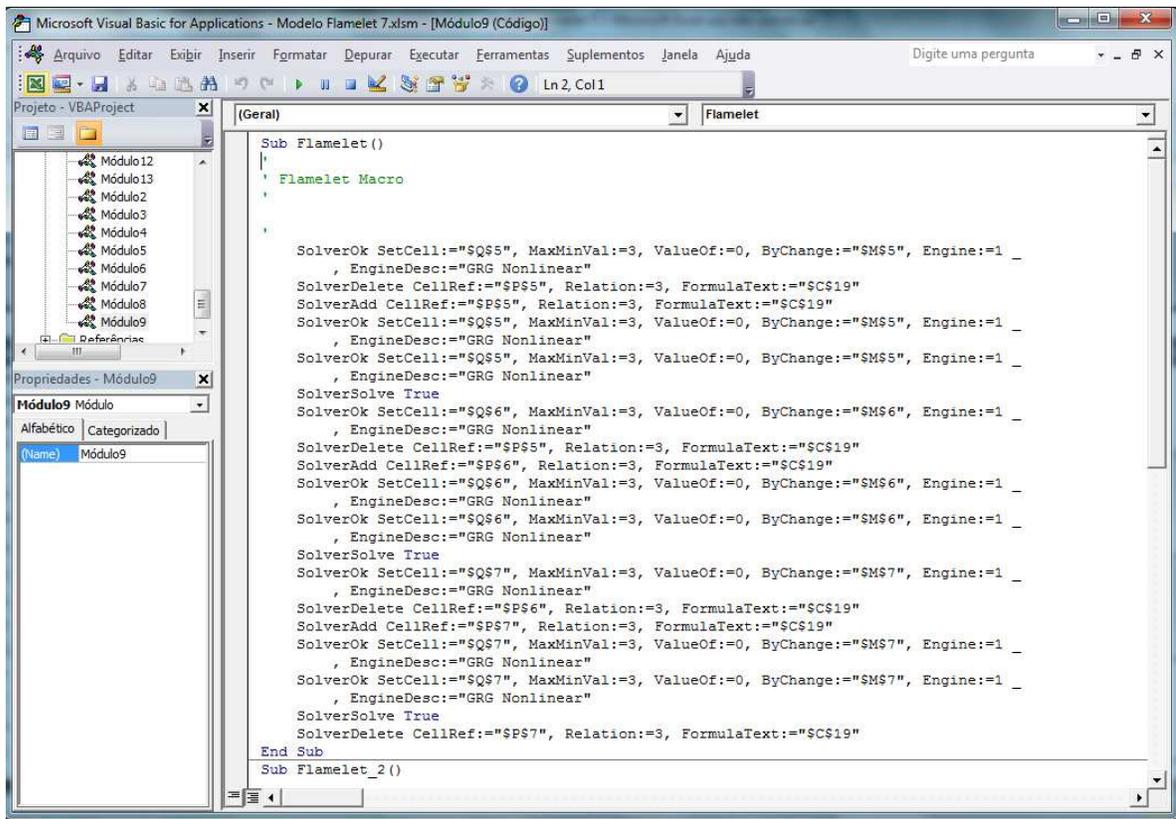


Figura 5.12: Screenshot do código em VBA da menor Macro que automatiza o uso da ferramenta Solver.

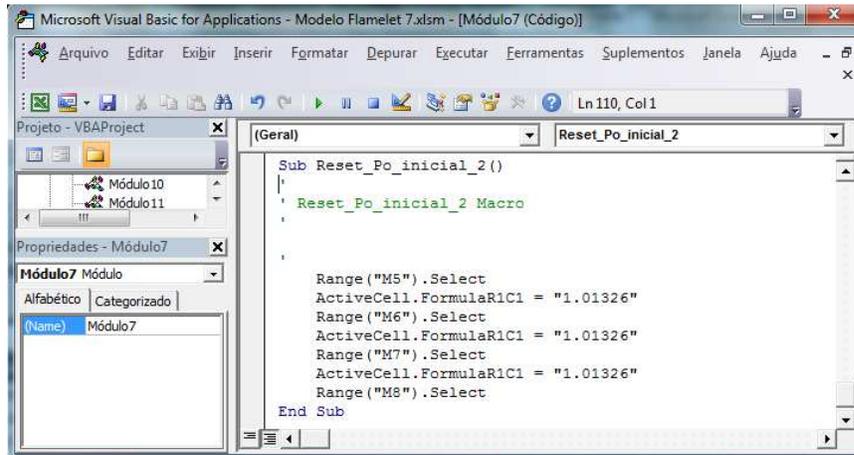


Figura 5.13: Screenshot do código em VBA da menor Macro que faz com que os valores de P_0 inicial retornem ao valor inicial.

Após a ferramenta Solver efetuar os cálculos, é necessário verificar se os valores da coluna “Zero” estão tendendo à zero, pois essa é a comprovação de que o Solver realmente

conseguiu convergir. Para facilitar a visualização dessa verificação, foi utilizado o recurso Formatação Condicional do *Excel*, que faz com que um símbolo específico apareça ao lado do valor de cada célula da coluna “Zero” de acordo com o seu valor numérico. O critério utilizado foi caso o valor da célula seja menor que 10^{-5} e maior que -10^{-5} um símbolo verde é exibido, indicando que o *Solver* convergiu para essa célula, caso contrário, um símbolo vermelho é apresentado.

A Figura 5.14 apresenta o *layout* de uma das abas da planilha em que o modelo foi implementado. Na parte superior da planilha é possível visualizar os botões “Reset” e “Calcular sobrepressão” que foram mencionados anteriormente. Além disso, na coluna “Zero”, também é possível visualizar os símbolos verdes previamente citados, que indicam que o *Solver* convergiu.

Um procedimento para utilização da planilha desenvolvida é apresentado no Apêndice A, onde são detalhados os principais passos que precisam ser realizados para a obtenção de resultados.

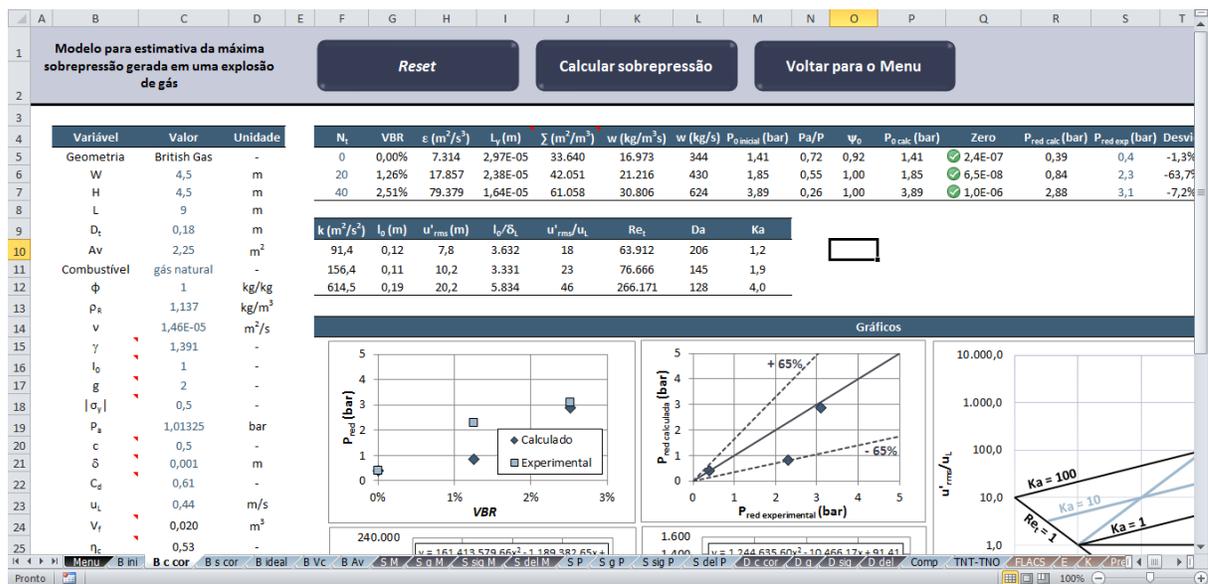


Figura 5.14: Layout de uma das abas da planilha que foi desenvolvida.

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

A seção 6.1 apresenta os resultados relativos ao experimento da *British Gas*, que foi descrito na subseção 5.3.1. Já a seção 6.2 expõe os resultados referentes ao experimento *SOLVEX*, que foi introduzido na subseção 5.3.2. A seção 6.3 exhibe os resultados do experimento da *DNV*, que foi detalhado na subseção 5.3.3. E finalmente, a seção 6.4 exhibe uma comparação entre os resultados do modelo proposto com os resultados de outros modelos existentes.

6.1 RESULTADOS PARA O EXPERIMENTO DA *BRITISH GAS*

6.1.1 Resultados iniciais

Inicialmente, a funcionalidade do modelo (Equação 5.13) foi avaliada variando os valores de u'_{rms} dentro de uma faixa de valores aceitáveis. Os resultados obtidos não foram muito condizentes com o esperado, pois para um baixo valor de intensidade turbulenta relativa (u'_{rms}/u_L), em torno de 0,76, a sobrepressão gerada pela explosão começou a decair, indicando o início do processo de extinção da chama devido ao seu estiramento. Esse efeito normalmente ocorre para valores mais altos de intensidade turbulenta relativa. De acordo com os resultados obtidos por Abdel-Gayed *et al.* (1984), para a combustão de uma mistura de 9,54% de metano em ar o processo de extinção da chama começou a ocorrer para um valor de u'_{rms}/u_L em torno de 25.

Para demonstrar esse decaimento inesperado da sobrepressão num nível de u'_{rms}/u_L não muito alto, a Figura 6.1 apresenta os resultados obtidos com o modelo proposto de sobrepressão máxima da explosão em função da intensidade relativa turbulenta. Os resultados em questão foram obtidos para três valores diferentes da constante C_L (constante do modelo da escala de comprimento integral do enrugamento, \hat{L}_y), com o intuito de salientar que mesmo se essa constante fosse ajustada, a sobrepressão iria continuar sujeita a esse decaimento em u'_{rms}/u_L em torno de 0,76.

Como um dos propósitos do modelo proposto é prever a máxima sobrepressão de uma explosão em um ambiente com obstruções que geram turbulência, e claramente o modelo não foi capaz de responder ao efeito da turbulência de acordo com o esperado, foi necessário estudar a modelagem mais profundamente, para tentar resolver essa questão.

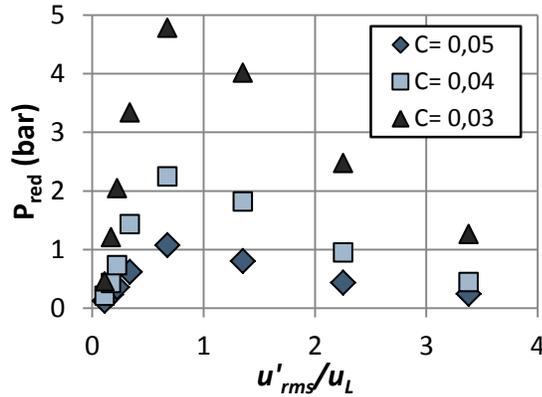


Figura 6.1: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da intensidade turbulenta relativa (u'_{rms}/u_L), resultados obtidos para C_L igual a 0,05, 0,04 e 0,03.

Analisando a modelagem mais a fundo observou-se que a função empírica (Equação 5.10) proposta por Abu-orf e Cant (2000), que leva em consideração os efeitos de extinção da chama, era a responsável por esse decaimento inesperado da sobrepressão, já que ela apresenta ponto de mínimo em u'_{rms}/u_L em torno de 0,76, de acordo com a Figura 6.2. Como a função empírica é diretamente proporcional à escala de comprimento integral de enrugamento (\hat{L}_y), e essa última é inversamente proporcional à razão área superficial da chama por unidade de volume (Σ), quando $f(u'_{rms}/u_L)$ é mínima, \hat{L}_y é mínima e, portanto, Σ é máxima, ou seja, esta função está determinando que a partir do valor de u'_{rms}/u_L em torno de 0,76 o processo de extinção da chama se inicia já que Σ começa a decair, e juntamente com ele, a sobrepressão gerada pela explosão.

$f(u'_{rms}/u_L)$ é função de duas constantes, C_{w1} e C_{w2} , que foram obtidas através de ajuste a dados experimentais e são iguais a 1,5 e 4, respectivamente (ABU-ORF e CANT, 2000). Para verificar se seria possível reverter o ponto de mínimo em u'_{rms}/u_L em torno de 0,76 através da alteração dos valores de C_{w1} e C_{w2} , foi feita uma análise do comportamento dessa função diante de alterações nos valores dessas constantes. A Figura 6.3 exhibe os resultados para variações de - 50%, 0%, +50% e +100% no valor de C_{w2} (C_{w2} igual a 2, 4, 6 e 8, respectivamente), mantendo C_{w1} igual a 1,5. Já a Figura 6.4 apresenta os resultados para as mesmas alterações em termos percentuais na constante C_{w1} (C_{w1} igual a 0,75, 1,5, 2,25 e 3) mantendo C_{w2} igual a 4.

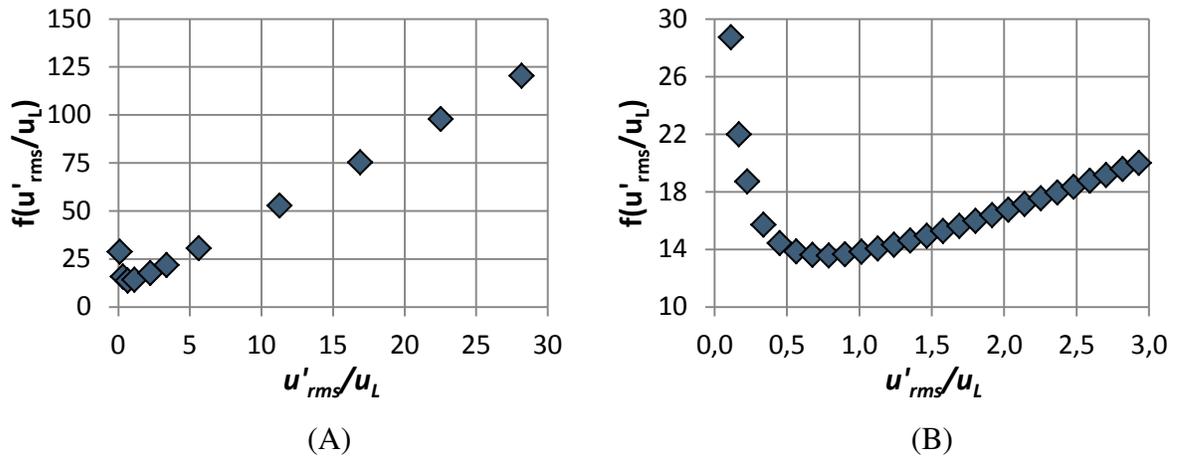


Figura 6.2: Gráficos da função empírica $f(u'_{rms}/u_L)$ de Abu-orf e Cant (2000), para u'_{rms}/u_L indo de 0 a 30 (A) e, com o intuito de facilitar a visualização do ponto de mínimo, para u'_{rms}/u_L indo de 0 a 3 (B).

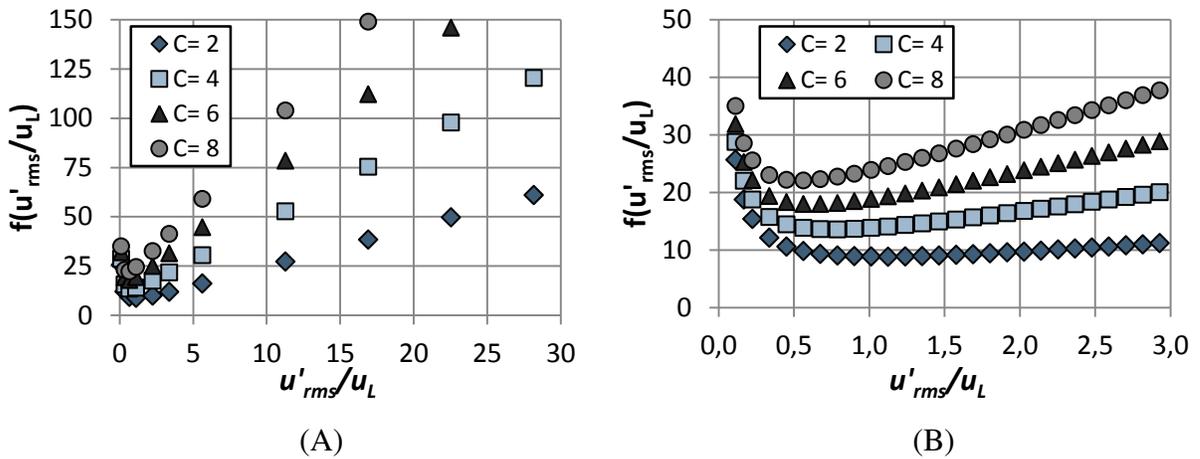


Figura 6.3: Gráficos da função empírica de Abu-orf e Cant (2000), para diferentes valores da constante C_{w2} (2, 4, 6 e 8) mantendo o valor de C_{wl} original (1,5), para u'_{rms}/u_L indo de 0 a 30 (A) e de 0 a 3 (B).

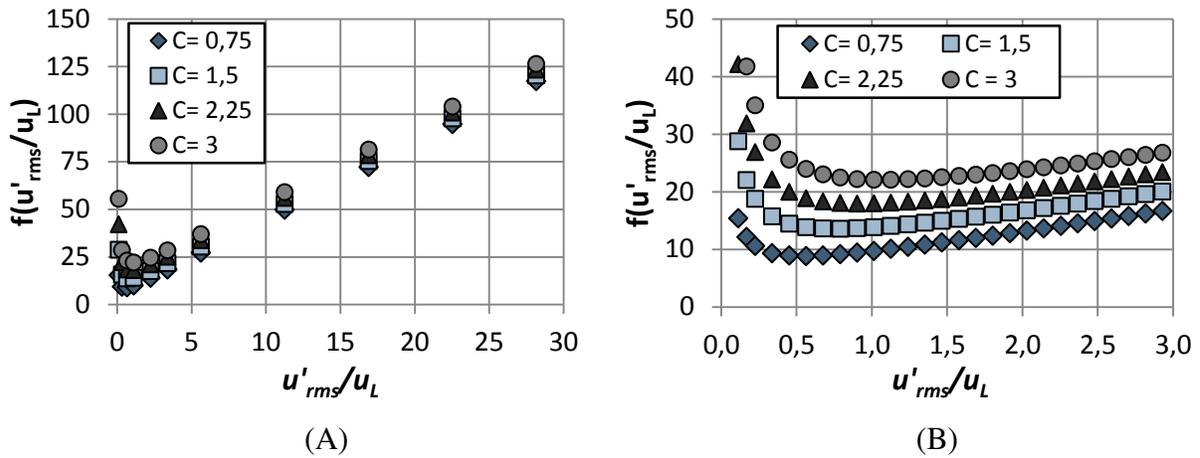


Figura 6.4: Gráficos da função empírica de Abu-orf e Cant (2000), para diferentes valores da constante C_{w1} (0,75, 1,5, 2,25 e 3) mantendo o valor de C_{w2} original (4), para u'_{rms}/u_L indo de 0 a 30 (A) e de 0 a 3 (B).

Analisando os gráficos da Figura 6.3 foi possível perceber que com a diminuição de C_{w2} , o ponto de mínimo é levemente deslocado para valores mais altos de u'_{rms}/u_L , mas essa alteração não chega a ser significativa. De acordo com a Figura 6.4, o ponto de mínimo também é deslocado para valores mais altos de u'_{rms}/u_L quando o valor de C_{w1} aumenta, porém novamente essa alteração não chega a ser suficiente para atingir o nível de intensidade turbulenta relativa esperado (em torno de 25). Com o intuito de verificar se o efeito combinado da diminuição de C_{w2} e do aumento de C_{w1} seria capaz de deslocar o ponto de mínimo para um valor de intensidade turbulenta relativa (u'_{rms}/u_L) mais próximo do esperado, a Figura 6.5 apresenta o gráfico da função empírica em questão para quatro diferentes conjuntos de valores de C_{w1} e C_{w2} .

Através da análise dos resultados da Figura 6.5 é possível verificar que conforme C_{w1} aumenta e C_{w2} diminui, o ponto de mínimo se desloca para níveis de intensidade turbulenta relativa (u'_{rms}/u_L) mais altos, porém para os casos com ponto de mínimo em valores mais elevados de u'_{rms}/u_L (caso $C_{w1} = 9$ e $C_{w2} = 0,2$ e caso $C_{w1} = 16,5$ e $C_{w2} = 0,04$) a função empírica adquire um formato que não proporciona uma representação adequada do efeito de extinção da chama, já que a partir do ponto de mínimo quase não há alteração no valor da função, ou seja, o decaimento da sobrepessão devido ao estiramento da chama não seria representado

adequadamente por essa função. Portanto, independente de alterações nos valores de C_{w1} e C_{w2} , o modelo continuaria apresentando um comportamento indesejado.

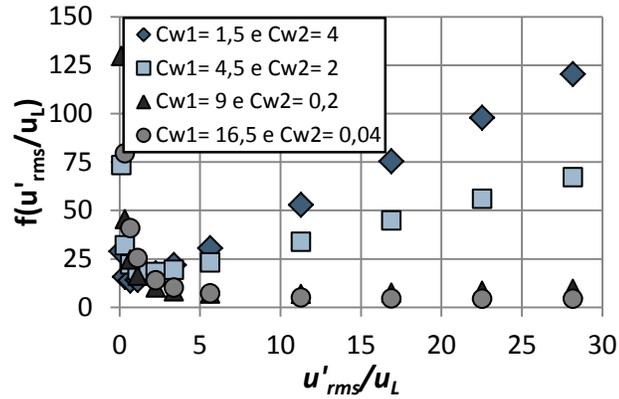


Figura 6.5: Gráfico da função empírica de Abu-orf e Cant (2000) para quatro diferentes conjuntos de valores das constantes C_{w1} e C_{w2} (1,5 e 4, 4,5 e 2, 9 e 0,2, 16,5 e 0,04).

A função empírica de Abu-orf e Cant (2000) foi desenvolvida para ser utilizada juntamente com a modelagem BML para a taxa de reação química, que por sua vez foi desenvolvida para ser empregada em códigos de *CFD*, onde o escoamento é resolvido ao longo do espaço e do tempo. Neste trabalho a modelagem BML foi adaptada para ser utilizada de modo a gerar um modelo mais simples, que somente estima a sobrepressão máxima dentro da câmara, e não consegue prever nem o tempo em que ela ocorre muito menos a sua localização exata. Portanto, devido às simplificações que foram feitas na modelagem, provavelmente a funcionalidade da função empírica foi prejudicada.

Diante deste fato, para dar continuidade ao desenvolvimento do modelo em questão, seria necessário encontrar uma alternativa para a resolução deste problema. Como a função empírica determina o valor da escala de comprimento integral do enrugamento (\hat{L}_y), uma possível solução seria tentar modelar \hat{L}_y utilizando uma abordagem diferente da proposta por Abu-orf e Cant (2000). Esta foi a alternativa adotada para a resolução dessa questão e, portanto, o modelo proposto (Equação 5.13), precisou passar por modificações na sua formulação.

6.1.2 O modelo modificado

De acordo com Bray e Cant (1991) a escala de comprimento integral do enrugamento (\hat{L}_y) assume um valor que é menor que o da escala de comprimento dos turbilhões maiores (l_0) e maior que o da escala de comprimento de Kolmogorov (η). Sabe-se também que quanto maior o número de Reynolds do escoamento os turbilhões pequenos se tornam cada vez menores (POPE, 2000). Durante uma explosão de gás em um ambiente obstruído turbulência é gerada, e, devido ao mecanismo *loop feedback* positivo de aceleração da chama (ver subseção 3.2.1) o nível de turbulência se torna cada vez maior e, por conseguinte, o número de Reynolds vai aumentando ao longo do tempo, e portanto, os turbilhões pequenos vão se tornando cada vez menores.

Levando essas informações em consideração, no momento em que a máxima sobrepressão dentro da câmara é atingida, os turbilhões pequenos estão bem menores que no início da explosão, e, portanto, torna-se razoável supor que os turbilhões pequenos são os principais responsáveis por causar o enrugamento da chama neste momento. Assim sendo, criou-se a hipótese de que a escala de comprimento integral do enrugamento (\hat{L}_y) é da ordem de grandeza da escala de comprimento de Kolmogorov (η), dado que esta última representa os menores turbilhões em um escoamento turbulento. Considerando essa hipótese, \hat{L}_y passaria a ser calculado através da Equação 2.25, sendo uma função da escala de comprimento dos turbilhões maiores (l_0) e do número de Reynolds turbulento (Re_t), que por sua vez são função da energia cinética turbulenta (k), da sua taxa de dissipação (ε) e da velocidade turbulenta *rms* (u'_{rms}). Com isso, substituindo a equação de η (Equação 2.25) no termo \hat{L}_y da Equação 5.7, após manipulação matemática, o modelo proposto passou a ser representado pela Equação 6.1, que não é mais função direta de u'_{rms} .

$$P_0 = \left\{ \frac{\left[\frac{\rho_R u_L l_0 g \bar{c}(1-\bar{c})}{|\bar{\sigma}_y|} \right] \left(\frac{\varepsilon}{1,5^3/2 \nu^3} \right)^{1/4} V_f}{C_d A_V \Psi_0 \left[\rho_R \gamma \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}} \right]^{0,5}} \right\}^2 \quad (6.1)$$

Agora, com esta nova formulação, a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta máxima (ε) torna-se o parâmetro que representa o efeito da presença de obstáculos na câmara. A mesma abordagem que foi proposta para estimar a energia cinética turbulenta (k) será empregada

na estimativa ε , ou seja, uma correlação de ε em função de VBR será obtida através dos dados das simulações de CFD que foram descritas na subseção 5.2.4.

6.1.3 Resultados das simulações no *FLACS*

Nesta subseção são apresentados os principais resultados das simulações que foram realizadas no *FLACS* pela *DNV GL*. A Figura 6.6 apresenta os resultados numéricos calculados através de CFD em termos de máxima sobrepressão da explosão para os três casos que são idênticos aos do experimento da *British Gas* (arranjos 1, 3 e 11 da Tabela 5.3) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), juntamente com os dados experimentais. E a Figura 6.7 compara os resultados de máxima sobrepressão da explosão obtidos através das simulações com o *FLACS* com os dados experimentais, com o intuito de facilitar a visualização dos desvios dos resultados obtidos com relação aos valores experimentais. Essa comparação com os dados experimentais foi feita com o intuito de se estabelecer a configuração dos casos de CFD a serem simulados no *FLACS*.

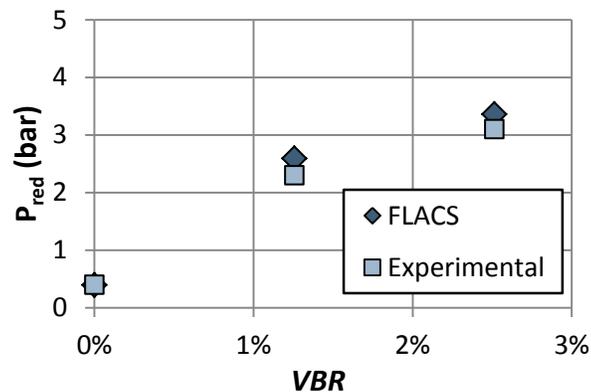


Figura 6.6: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os valores obtidos com as simulações no *FLACS* e os dados experimentais da *British Gas*.

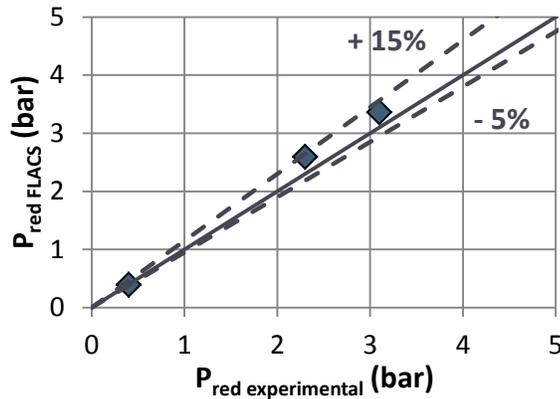


Figura 6.7: Gráfico de comparação entre os resultados do *FLACS* e os do experimento da *British Gas* em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}), onde as retas tracejadas representam desvio igual a + 15% e - 5% e a reta contínua representa desvio igual a zero.

Através da análise do gráfico da Figura 6.6 é possível verificar que as simulações realizadas no *FLACS* foram capazes de representar adequadamente o experimento da *British Gas*, gerando resultados bem próximos aos do experimento. De acordo com a Figura 6.7 os desvios obtidos ficaram dentro da faixa + 15 a - 5%, que é um intervalo aceitável para desvios de simulações deste tipo, e, portanto, os dados das simulações do *FLACS* puderam ser utilizados no desenvolvimento do modelo.

Com o intuito de demonstrar como o fenômeno da explosão foi representado nas simulações do *FLACS*, a Figura 6.8 apresenta os resultados em termos de fração mássica de combustível e vetor velocidade que foram obtidos da simulação do arranjo número 2 da Tabela 5.3 em três instantes de tempo diferentes.

Analisando a Figura 6.8 é possível observar como o fenômeno da explosão de gás ocorre dentro da câmara. Inicialmente (no tempo 0 s) a câmara estava completamente preenchida com a mistura estequiométrica de combustível e ar (Figura 6.8 A) Após a ignição, a reação química de combustão se inicia no lado da câmara oposto ao *vent*. Com isso os reagentes começam a ser consumidos e os produtos quentes da combustão se expandem e empurram os reagentes na direção do *vent* (Figura 6.8 B). Dentro da câmara a chama se propaga na direção do *vent* (da Figura 6.8 B para Figura 6.8 C). Também é possível ver que conforme a chama se aproxima do *vent*, a velocidade dos reagentes que estão saindo pelo *vent* aumenta (setas na Figura 6.8 B para

Figura 6.8 C vão de azul para verde), demonstrando o efeito de aceleração da chama devido à presença de obstáculos dentro da câmara.

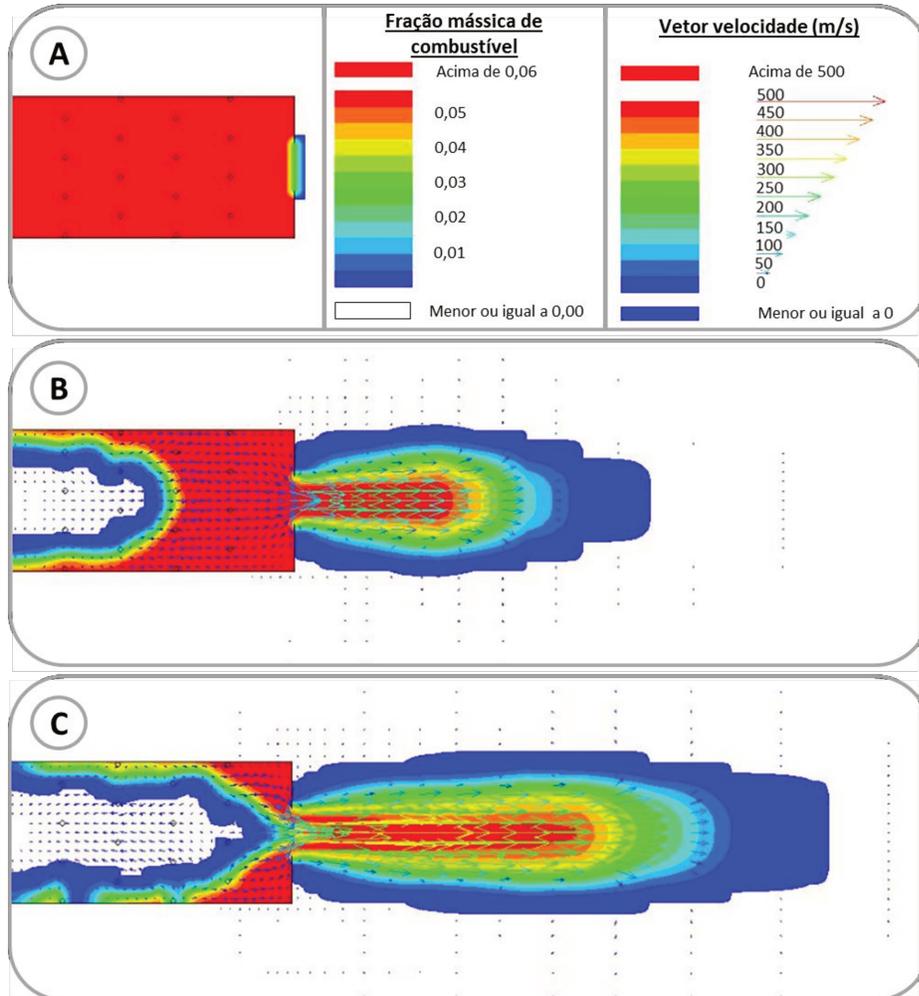


Figura 6.8: Resultados em termos de fração mássica de combustível e vetor velocidade obtidos das simulações do *FLACS* para o arranjo de número 2 nos tempos: 0 s (A), 0,457 s (B) e 0,517 s (C).

Com os dados das 13 simulações que foram realizadas no *FLACS* foi possível obter as correlações da energia cinética turbulenta e da sua taxa de dissipação (k e ε , respectivamente), ambas em função de VBR . Para isso foi necessário escolher o melhor tipo de regressão dentre os disponíveis no *Microsoft Excel*. Como um dos casos do experimento da *British Gas* que se deseja analisar, a câmara vazia, apresenta VBR igual a 0%, as regressões logarítmica e potência não poderiam ser utilizadas, a primeira porque logaritmo neperiano de zero não existe, e a segunda

porque zero elevado a qualquer número é igual à zero, o que geraria resultados de ε e k iguais à zero nesse ponto, o que não faz sentido físico. Restam as regressões exponencial, linear e polinomial. A regressão linear também não poderia ter sido utilizada, já que apresentou coeficiente linear negativo, ou seja, para VBR igual a 0% os valores de ε e k seriam negativos nesse ponto, o que não tem sentido físico. Já a regressão exponencial não se ajustou muito bem aos pontos, pois para altos valores de VBR , devido ao seu caráter exponencial, os valores estimados de ε e k seriam muito maiores que o desejado. Finalmente, a regressão polinomial de segunda ordem foi a que melhor se ajustou aos dados, e apresentou os maiores valores de coeficiente de determinação (R^2).

A Figura 6.9 apresenta os valores máximos de ε em função de VBR obtidos para as 13 simulações realizadas no *FLACS*, já a Figura 6.10 traz os valores máximos de k em função de VBR para as mesmas simulações, juntamente com as curvas das regressões polinomiais realizadas para obtenção das correlações de interesse (Equações 6.2 e 6.3). É importante ressaltar que as correlações são válidas somente para a faixa de VBR que foi analisada (VBR menor que 3,5%).

$$\varepsilon = 1,61 \times 10^8 VBR^2 - 1,19 \times 10^6 VBR + 7,31 \times 10^3 \quad (6.2)$$

$$k = 1,25 \times 10^6 VBR^2 - 1,05 \times 10^4 VBR + 91,4 \quad (6.3)$$

Utilizando a correlação de ε na Equação 6.1, o modelo proposto passa a ser representado pela Equação 6.4.

$$P_0 = \left\{ \frac{\left[\frac{\rho_R u_L I_0 g \bar{c}(1-\bar{c})}{|\bar{\sigma}_y|} \right] \left(\frac{1,61 \times 10^8 VBR^2 - 1,19 \times 10^6 VBR + 7,31 \times 10^3}{1,5^{3/2} \nu^3} \right)^{1/4} V_f}{C_d A_V \Psi_0 \left[\rho_R \gamma \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}} \right]^{0,5}} \right\}^2 \quad (6.4)$$

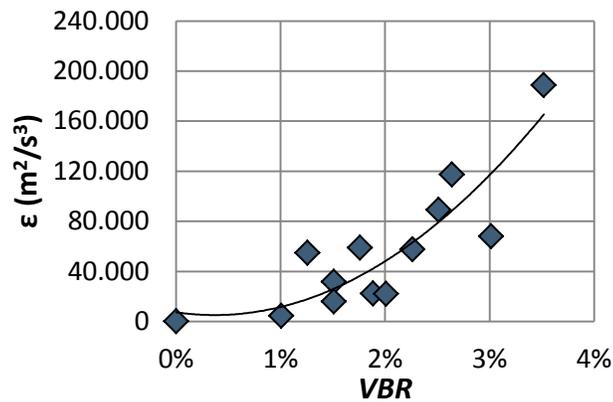


Figura 6.9: Gráfico da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta máxima (ϵ) em função da razão de bloqueio de volume (VBR) para os 13 casos simulados no *FLACS*, juntamente com a curva da regressão polinomial.

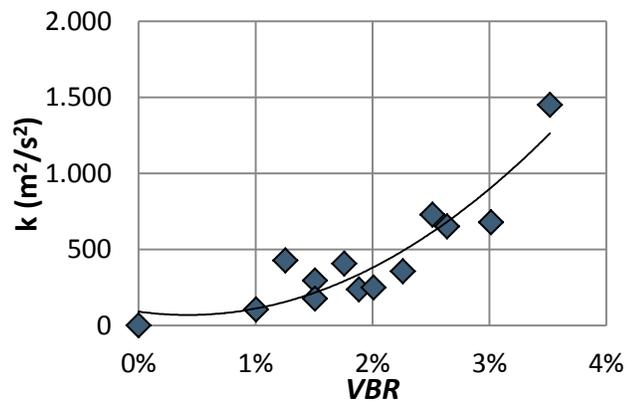


Figura 6.10: Gráfico da energia cinética turbulenta máxima (k) em função da razão de bloqueio de volume (VBR) para os 13 casos simulados no *FLACS*, juntamente com a curva da regressão polinomial.

Analisando os gráficos das Figuras 6.9 e 6.10 é possível observar que tanto a energia cinética turbulenta máxima quanto a sua taxa de dissipação não são funções apenas da razão de bloqueio de volume, já que para dois casos com arranjos de tubos diferentes, mas com o mesmo valor de VBR , tanto ϵ quanto k apresentaram valores diferentes, o que já era esperado, já que diversos fatores influenciam a explosão além de VBR (ver seção 3.2). Portanto provavelmente as correlações (Equações 6.2 e 6.3) não serão capazes de representar adequadamente o comportamento de k e ϵ , mesmo elas tendo apresentando valores de coeficiente de determinação

(R^2) de 0,78 e 0,85 (para ε e k , respectivamente) que são valores próximos a 1, que indicam que as correlações obtidas se ajustaram relativamente bem aos dados de ε e k .

6.1.4 Resultados do modelo modificado

O modelo modificado foi utilizado para estimar as sobrepressões máximas do experimento da *British Gas*. A Figura 6.11 A mostra os resultados obtidos com o modelo utilizando a correlação para estimar ε (Equação 6.4), juntamente com os dados experimentais. E, com o intuito de comparação, a Figura 6.11 B apresenta os resultados obtidos com o modelo utilizando os valores de ε fornecidos pelas simulações do *FLACS* (pontos do gráfico da Figura 6.9) diretamente na Equação 6.1. Além disso, com o propósito de facilitar a visualização dos desvios dos resultados obtidos com relação aos dados experimentais, a Figura 6.12 compara os valores de sobrepressão máxima da explosão calculada e experimental, tanto para os resultados do modelo com a correlação de ε quanto para os sem a correlação.

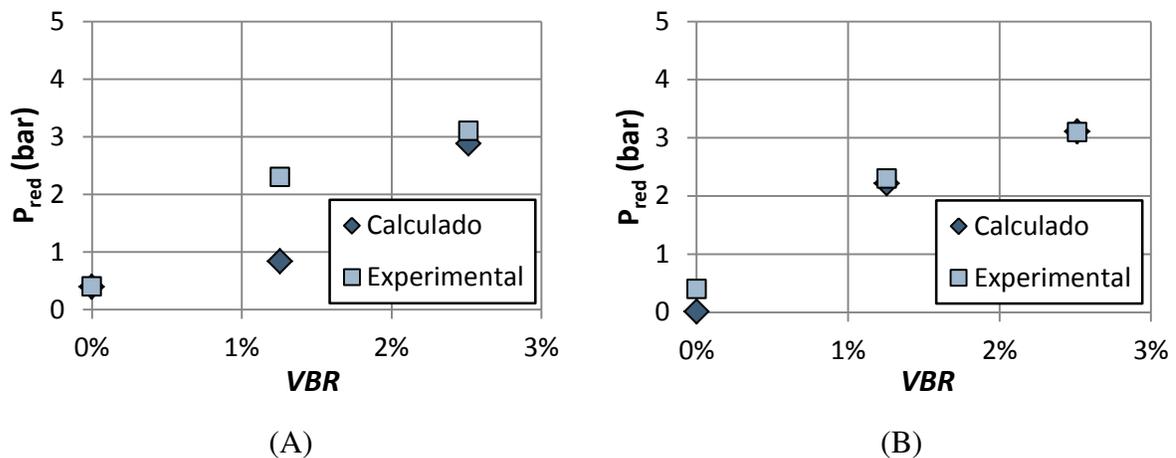


Figura 6.11: Gráficos da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR): comparação dos resultados obtidos com o modelo utilizando a correlação para estimar ε com os dados experimentais da *British Gas* (A) e comparação dos resultados obtidos com o modelo utilizando os valores de ε do *FLACS* com os dados experimentais da *British Gas* (B).

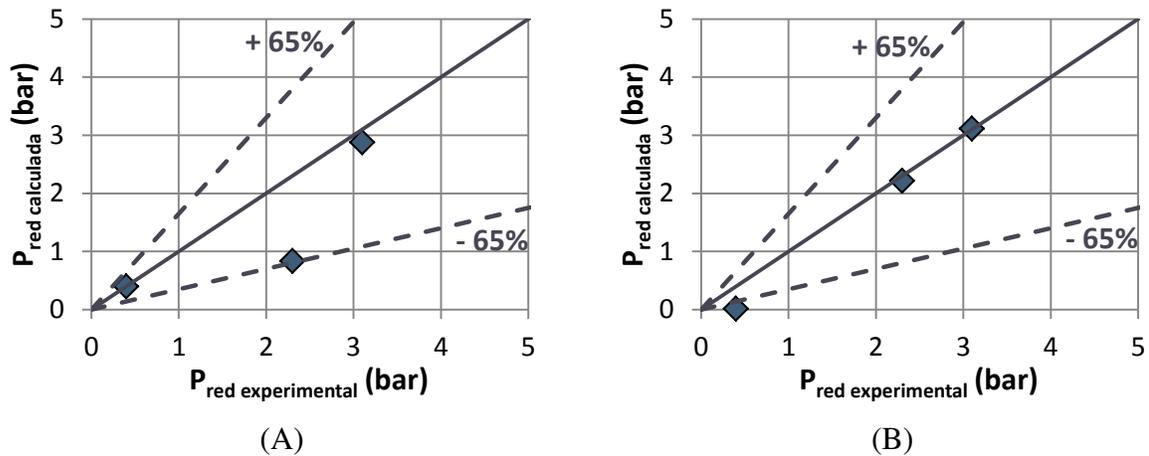


Figura 6.12: Gráficos de comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os dados do experimento da *British Gas* em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}), resultados obtidos utilizando a correlação de ε no modelo (A), e utilizando os valores de ε das simulações no modelo (B). As retas tracejadas representam desvio igual a + 65% e - 65% e as retas contínuas representam desvio igual a zero.

Observando a Figura 6.11 A é possível verificar que para os casos *VBR* igual a 0 e 2,5%, o modelo conseguiu prever a sobrepressão máxima da explosão com alto grau de exatidão, já que os desvios obtidos nesses casos foram extremamente baixos (pontos $P_{red} \text{ experimental}$ igual a 0,4 e 3,1 bar da Figura 6.12 A). Contudo, para o caso de *VBR* igual a 1,3%, o modelo não conseguiu prever adequadamente a sobrepressão máxima da explosão, que foi subestimada, o que demonstra que a correlação de ε em função de *VBR* proposta não foi capaz de representar adequadamente o comportamento de ε para esse caso. Isso deixa claro que ε não é influenciado apenas por *VBR*, e que outros parâmetros precisariam ter sido levados em consideração no desenvolvimento dessa correlação.

Porém, quando os valores de ε das simulações do *FLACS* foram utilizados diretamente no modelo, Figura 6.11 B, o mesmo conseguiu representar adequadamente o comportamento da sobrepressão para os casos *VBR* igual a 1,3 e 2,5%, uma vez que os desvios para esses casos foram desprezíveis (pontos $P_{red} \text{ experimental}$ igual a 2,3 e 3,1 bar da Figura 6.12 B). Entretanto para o caso da câmara vazia (*VBR* igual a 0%), o modelo não foi muito exato, e isso ocorreu porque o valor de ε do *FLACS* para esse caso foi extremamente baixo, da ordem de $20 \text{ m}^2/\text{s}^3$, que é de uma ordem de grandeza muito pequena quando comparado com os outros casos (para *VBR* indo de 1,0 a 3,5% ε variou de $4,4 \times 10^3$ a $1,9 \times 10^5 \text{ m}^2/\text{s}^3$), o que indica que o simulador

subestimou o valor de ε para o caso da câmara sem tubos. Isso demonstra que o modelo tem potencial para calcular a sobrepressão máxima de uma explosão em uma câmara com tubos similar à do experimento da *British Gas*, mas para um melhor desempenho do modelo seria fundamental que uma correlação mais adequada para ε fosse desenvolvida. Porém o potencial de aplicação do modelo pode estar restrito apenas a câmaras contendo obstáculos internos, o que não representa uma desvantagem, já que a câmara sem tubos não é um caso muito realista uma vez que módulos *offshore* contêm diversos tipos de obstruções.

Além disso, apesar de os desvios apresentados para o caso de VBR igual a 1,3% (ponto $P_{red\ experimental}$ igual a 2,3 bar da Figura 6.12 A) e para o caso de VBR igual a 0% (ponto $P_{red\ experimental}$ igual a 0,4 bar da Figura 6.12 B) terem sido um tanto quanto altos, é pertinente mencionar que em geral correlações empíricas e semi-empíricas para explosões de gás podem apresentar desvios relativamente elevados. Por exemplo, através de uma correlação para explosão de metano, Huser *et al.* (2009) obtiveram resultados cuja maioria se encontrava dentro de uma faixa entre 100% e - 50% de desvio com relação aos dados experimentais, alguns resultados chegaram até a 400% e - 80% de desvio. Além disso, Razus e Krause (2001) avaliaram dez correlações desse tipo, e, para explosão de metano, também obtiveram desvios de até 150% e - 60% em alguns casos.

Ainda analisando os resultados da Figura 6.11 B, foi possível constatar que a hipótese utilizada na criação do modelo modificado (de que o valor da escala de comprimento integral do enrugamento pode ser considerado da mesma ordem de grandeza que o da escala de comprimento de Kolmogorov no momento em que a sobrepressão é máxima), mostrou-se ser uma suposição bastante razoável, uma vez que o modelo conseguiu prever a sobrepressão com bastante exatidão para os casos com obstruções.

Com relação ao desenvolvimento de uma correlação mais adequada para ε com o intuito de possibilitar o cálculo mais exato da sobrepressão em explosões em outras câmaras similares à do experimento da *British Gas*, seria interessante levar em consideração outros parâmetros que influenciam a sobrepressão gerada em uma explosão de gás, além da razão de bloqueio de volume (VBR). Analisando os dados da Figura 6.9 separados por número de colunas na câmara (NC), Figura 6.13, foi possível observar outro parâmetro que poderia ser incluído na correlação.

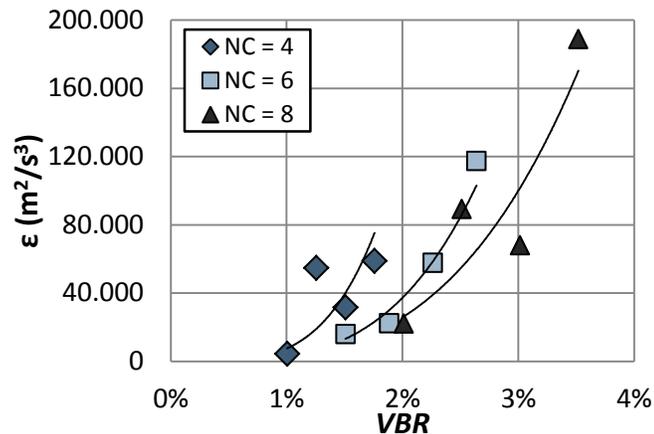


Figura 6.13: Gráfico da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta máxima (ϵ) em função da razão de bloqueio de volume (VBR) para os 13 casos simulados no *FLACS*, dados separados de acordo com o número de colunas do arranjo (NC).

Observando a Figura 6.13 é possível notar que para dois casos com o mesmo valor de VBR (1,5%), ou seja, mesmo número de tubos dentro da câmara, o caso com menos colunas apresentou um maior valor de ϵ que o caso com mais colunas. Para um mesmo número de tubos total, um caso com menos colunas apresenta mais tubos por coluna, e conseqüentemente possui uma razão de bloqueio de área (ABR) maior. De acordo com Bjerketvedt *et al.* (1997), para um dado valor de VBR , quanto maior o valor de ABR menor a área transversal disponível para o escoamento dos gases, e com isso, mais turbulência é gerada. Como a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ϵ) está diretamente ligada à turbulência, um caso com um maior valor de ABR apresentará um valor de ϵ maior que com caso com um menor valor de ABR . Tendo isto em vista, seria interessante adicionar o efeito dessa variável (ABR) na correlação de ϵ , com o intuito de aprimorá-la.

Uma alternativa para incluí-lo seria utilizar a metodologia de superfície de resposta e o planejamento experimental. No planejamento experimental, os valores (níveis) que as variáveis independentes (fatores) irão assumir são pré-definidos e experimentos envolvendo diferentes combinações entre níveis de dois ou mais fatores são realizados para determinar as alterações em uma ou mais variáveis dependentes (respostas). Após esta etapa, os dados obtidos são utilizados para a criação de uma superfície de resposta através do ajuste de um modelo matemático aos dados experimentais (FERREIRA, 2014).

Num planejamento fatorial 2^3 , por exemplo, são definidos dois níveis para cada um dos três fatores, dando um total de oito experimentos que precisam ser realizados para se obter os resultados necessários em termos da variável de resposta. Para o caso em questão, poderia ser realizado um planejamento fatorial 3^2 , onde são definidos três valores diferentes (níveis) para os dois fatores analisados (*ABR* e *VBR*), num total de nove experimentos necessários para determinar alterações na resposta (ε).

Na fase inicial de desenvolvimento do modelo, quando os arranjos das simulações do *FLACS* foram definidos, tinha-se como objetivo obter uma correlação de k em função de *VBR* que seria utilizada para estimar valores k e, por conseguinte, valores de u'_{rms} (que era o parâmetro que representava a presença de obstáculos na câmara no modelo inicialmente proposto). Os arranjos foram definidos diante deste contexto e, por isso, não foram estipulados níveis para *ABR* e *VBR*, e, portanto, com os dados das treze simulações que foram realizadas não seria possível utilizar a metodologia de superfície de resposta para obter uma correlação de ε em função de *ABR* e *VBR*. Para atingir esse objetivo seria necessário simular mais alguns arranjos de tubos específicos no *FLACS*, de modo a aproveitar alguns dos resultados que já estão disponíveis.

6.1.5 Avaliação da resposta do modelo a alterações em variáveis de entrada

A resposta do modelo com relação a alterações no grau de preenchimento da câmara (V_C/V) e na área transversal ocupada pelo *vent* (A_V/A_W) foi avaliada. Contudo, de acordo com os resultados obtidos na subseção 6.1.4, como a correlação de ε em função de *VBR* (Equação 6.2) não representou adequadamente o comportamento de ε e precisa ser aprimorada, e ainda, como o valor de ε do *FLACS* para a câmara sem tubos foi subestimado, optou-se por obter os resultados a seguir assumindo que uma correlação ideal para ε em função de *VBR* foi desenvolvida.

A Equação 6.5 representa a correlação em questão, que foi obtida através de uma regressão polinomial dos dados do gráfico da Figura 6.14, em que os valores de ε presentes nesse gráfico são os que tornam nulos os desvios entre os resultados do modelo e os do experimento da *British Gas* em termos de sobrepressão máxima.

$$\varepsilon = -6,00 \times 10^7 VBR^2 - 4,74 \times 10^6 VBR + 7,45 \times 10^3 \quad (6.5)$$

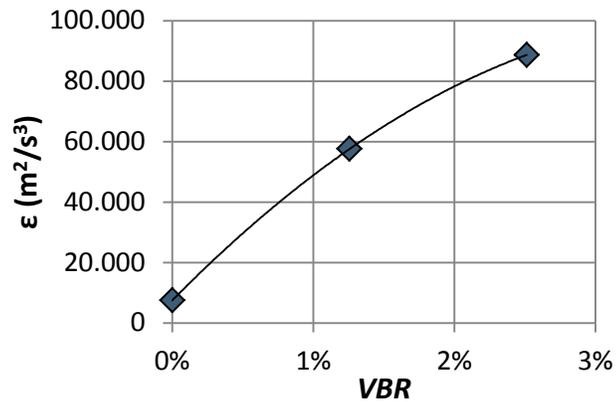


Figura 6.14: Gráfico da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta máxima (ϵ) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), juntamente com a curva da regressão polinomial. Os valores de ϵ desse gráfico são os que tornam nulo o desvio entre os resultados do modelo e os do experimento da *British Gas* em termos de sobrepressão máxima.

A Figura 6.15 traz o gráfico da sobrepressão máxima da explosão em função da razão de bloqueio de volume para diferentes valores do grau de preenchimento da câmara (V_C/V), que nada mais é do que a razão entre o volume da nuvem inflamável (V_C) sobre o volume total da câmara (V).

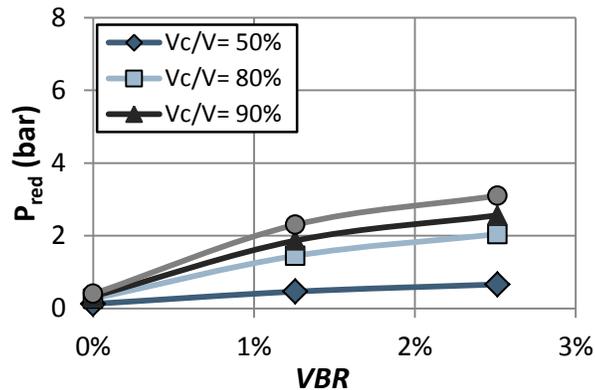


Figura 6.15: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR) para diferentes graus de preenchimento da câmara (V_C/V). A curva com V_C/V igual a 100% representa o experimento da *British Gas*.

Analisando o gráfico da Figura 6.15 é possível observar que quanto maior o grau de preenchimento da câmara (V_C/V), maior a sobrepressão gerada pela explosão. O que faz sentido,

já que, de acordo com Bjerketvedt *et al.* (1997), para um volume da nuvem inflamável maior, haverá mais combustível na câmara para ser queimado, e, portanto, a sobrepressão gerada será maior. Além disso, foi possível observar que quanto maior o grau de preenchimento da câmara, o efeito do aumento da sobrepressão com o aumento da razão de bloqueio de volume se torna mais pronunciado. Portanto o modelo proposto é capaz de representar adequadamente essa tendência de aumento da sobrepressão devido ao aumento do grau de preenchimento da câmara com obstruções, contanto que uma correlação para ε mais adequada que a Equação 6.2 seja desenvolvida.

A Figura 6.16 traz o gráfico da sobrepressão máxima da explosão em função da razão de bloqueio de volume para diferentes valores de área transversal ocupada pelo vent (A_V/A_W), que é representado pela razão área do vent (A_V) sobre área da parede que o contém (A_W).

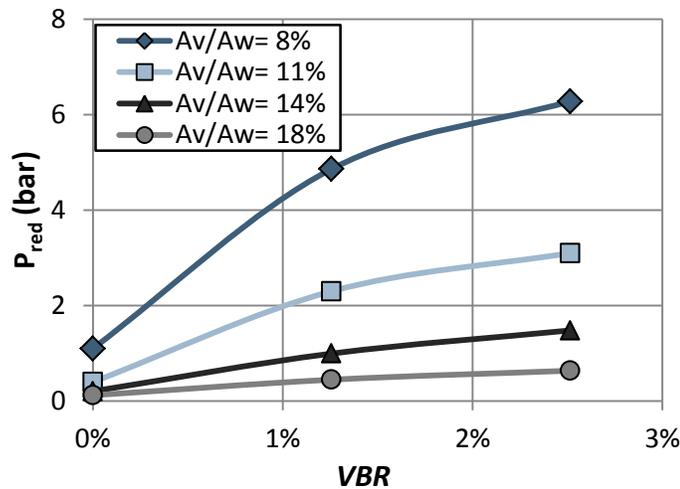


Figura 6.16: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR) para diferentes valores de área transversal ocupada pelo vent (A_V/A_W). A curva com A_V/A_W igual a 11% representa o experimento da *British Gas*.

Através da análise do gráfico da Figura 6.16 é possível ver que quanto menor a área transversal ocupada pelo vent (A_V/A_W), maior a sobrepressão gerada. O que é totalmente plausível, já que, segundo Bjerketvedt *et al.* (1997), para uma área de vent menor, a vazão mássica de gás saindo da câmara pelo vent é menor, e com isso o efeito da expansão dos produtos não é muito reduzido pelo vent, e a sobrepressão gerada será maior. Além disso, foi possível

notar que quanto menor a área transversal ocupada pelo *vent*, o efeito do aumento da sobrepressão com o aumento da razão de bloqueio de volume é mais pronunciado. Portanto o modelo proposto consegue representar adequadamente essa tendência de aumento da sobrepressão devido à diminuição da área transversal ocupada pelo *vent* em uma câmara obstruída, contanto que uma correlação mais apropriada para ε seja desenvolvida.

6.1.6 Verificação do regime em que se encontra a chama

O modelo foi desenvolvido com base no conceito *flamelet*, portanto nada mais plausível do que verificar se a chama realmente se encontra nesse regime. Para isso, os números adimensionais de Damköhler (Da), Karlovitz (Ka) e Reynolds turbulento (Re_t) foram estimados de três formas diferentes: utilizando as correlações de ε e k (Equações 6.2 e 6.3), utilizando os valores de ε e k obtidos diretamente das simulações do *FLACS* (pontos dos gráficos das Figura 6.9 e Figura 6.10) e utilizando as correlações de ε ideal e a de k (Equações 6.5 e 6.3). Os resultados obtidos foram dispostos no diagrama de Borghi modificado com duas retas adicionais em azul, Damköhler (Da) igual a um e Karlovitz (Ka) igual a dez, com a finalidade de facilitar a compreensão dos resultados. A Figura 6.17 expõe o diagrama com os resultados para o primeiro caso, a Figura 6.18 para o segundo e a Figura 6.19 para o terceiro.

De acordo com Veynante e Vervisch (2002), a chama se encontra no regime *flamelet* quando os seguintes critérios são satisfeitos: $Da \gg 1$, $Ka < 1$ e $Re_t > 1$. Quando o número de Damköhler é muito maior que um, os maiores turbilhões do escoamento possuem escala de tempo (τ_0) maior que a escala de tempo químico (τ_c), e por isso a chama possui uma zona de reação fina e a sua estrutura interna não é muito afetada pela turbulência, porém a sua superfície é enrugada. Para um número de Karlovitz menor que um, os menores turbilhões do escoamento, representados pela escala de Kolmogorov, possuem uma escala de tempo (τ_η) maior que a escala de tempo químico (τ_c), ou seja, a estrutura interna da chama não é afetada pelos movimentos turbulentos já que eles são muito lentos. Já um número de Reynolds turbulento maior que um indica que o escoamento é turbulento. Essas são as principais características de uma chama que se encontra no regime *flamelet*.

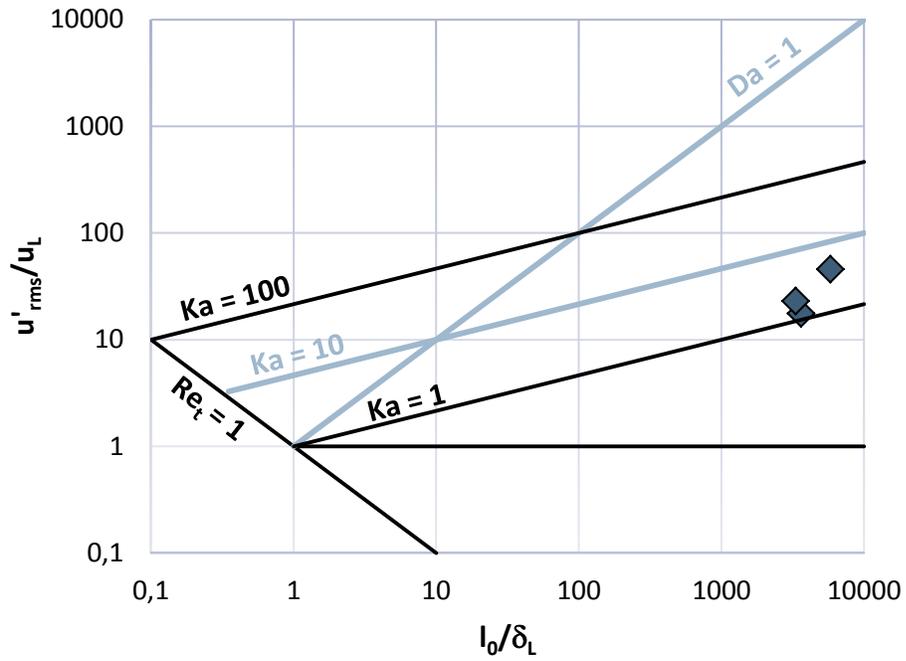


Figura 6.17: Resultados obtidos dispostos no Diagrama de Borghi modificado para Da , Ka , e Re_t , estimados utilizando as correlações de ε e k .

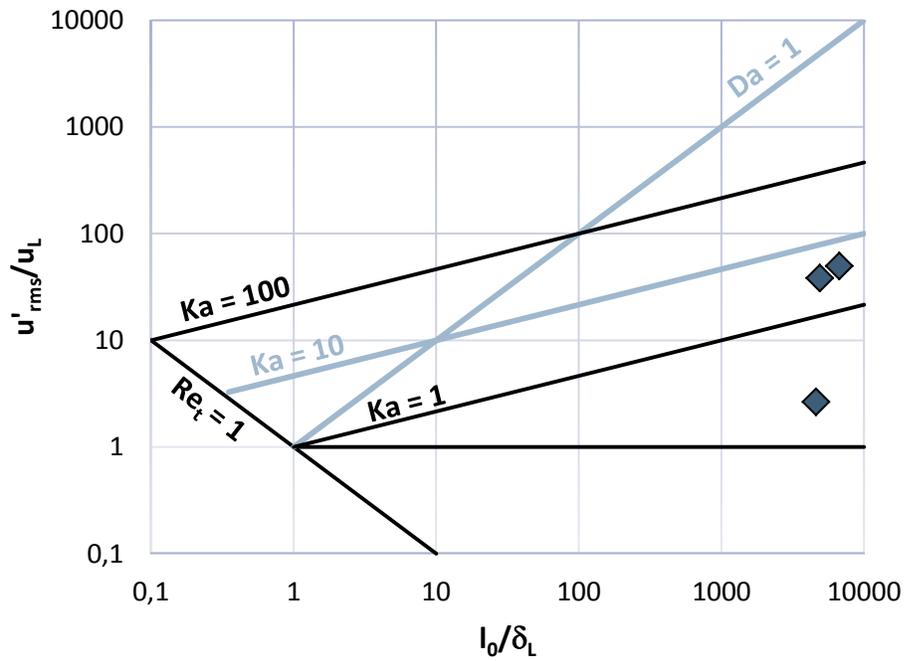


Figura 6.18: Resultados obtidos dispostos no Diagrama de Borghi modificado para Da , Ka e Re_t , estimados empregando os valores de ε e k das simulações do FLACS.

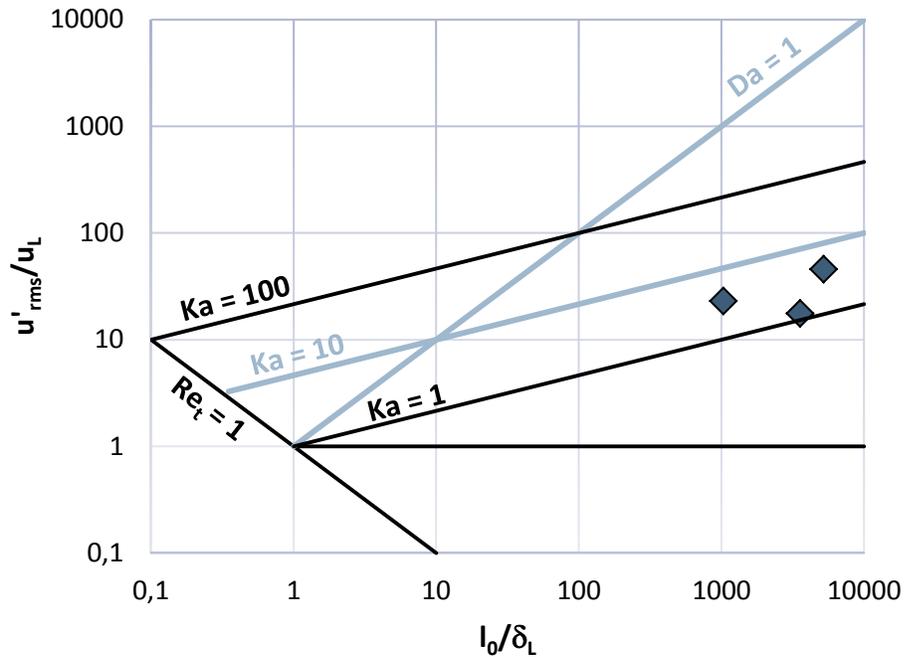


Figura 6.19: Resultados obtidos dispostos no Diagrama de Borghi modificado para Da , Ka e Re_t , estimados utilizando as correlações de ε ideal e k .

Nos três casos analisados (Figura 6.17, Figura 6.18 e Figura 6.19) é possível verificar que os pontos se encontram na região Damköhler maior que um (abaixo da reta $Da = 1$), e como eles estão bem distantes dessa reta, o número de Damköhler é realmente muito maior que um, ou seja, o primeiro critério foi satisfeito. É possível ver também que os pontos se encontram na região de Reynolds turbulento maior que um (acima da reta $Re_t = 1$), e, portanto, o terceiro critério foi satisfeito.

Com relação ao segundo critério ($Ka < 1$), pode-se observar que somente um ponto caiu na região de Karlovitz menor que um (abaixo da reta $Ka = 1$), o ponto para o caso VBR igual a 0% da Figura 6.18, e ele somente está presente nessa região porque os valores de ε e k foram subestimados pelo $FLACS$. Todos os outros pontos estão localizados na região $1 < Ka < 10$.

Este fato poderia a princípio indicar que a chama não se encontra no regime *flamelet*, porém, de acordo com Poinot e Veynante (2005), os critérios e os limites dos regimes do diagrama são baseados na ordem de magnitude das estimativas e não em derivações precisas, e por isso, o critério de Klimov-Williams (que determina a reta $Ka = 1$), poderia muito bem corresponder a $Ka = 10$ ou a $Ka = 0,1$. Além disso, ainda segundo Poinot e Veynante (2005),

diagramas mais modernos (diagramas espectrais), baseados em dados de *DNS* e não somente em análise dimensional, indicam que a região do regime *flamelet* é um pouco maior que a representada no diagrama de Borghi modificado, e se estende na direção de níveis mais altos de intensidade turbulenta (u'_{rms}/u_L), ou seja, na direção de Karlovitz maior que um. Portanto, levando essas informações em consideração, o segundo critério poderia muito bem ser substituído por $Ka < 10$. Como todos os pontos se encontram abaixo da reta $Ka = 10$, pode-se considerar que nos três gráficos analisados o segundo critério foi satisfeito.

Já que os três critérios foram atendidos, a chama se encontra no regime *flamelet*, ou seja, ela é fina e enrugada e a sua estrutura interna não é muito afetada pela turbulência, e consequentemente o significado físico do modelo foi mantido. Entretanto é importante ressaltar que dentre as três formas para estimar os números adimensionais de Damköhler, Karlovitz e Reynolds turbulento utilizadas, a mais confiável é a segunda, da Figura 6.18, em que foram empregados os valores de ε e k obtidos diretamente das simulações do *FLACS*, apesar do ponto discrepante para *VBR* igual a 0%. Os resultados que estão sujeitos às correlações são menos confiáveis, já que elas não estão representando da melhor maneira possível o comportamento das variáveis ε e k .

6.2 RESULTADOS PARA O EXPERIMENTO *SOLVEX*

6.2.1 Resultados iniciais

O modelo modificado (Equação 6.4) foi utilizado para estimar as sobrepressões máximas do experimento *SOLVEX*. As Figuras 6.20 e 6.21 apresentam os resultados obtidos para a mistura estequiométrica ar e metano e para a mistura estequiométrica ar e propano, juntamente com os dados do experimento em questão. Esses resultados foram obtidos utilizando os dados de entrada do modelo que foram introduzidos na seção 5.2.

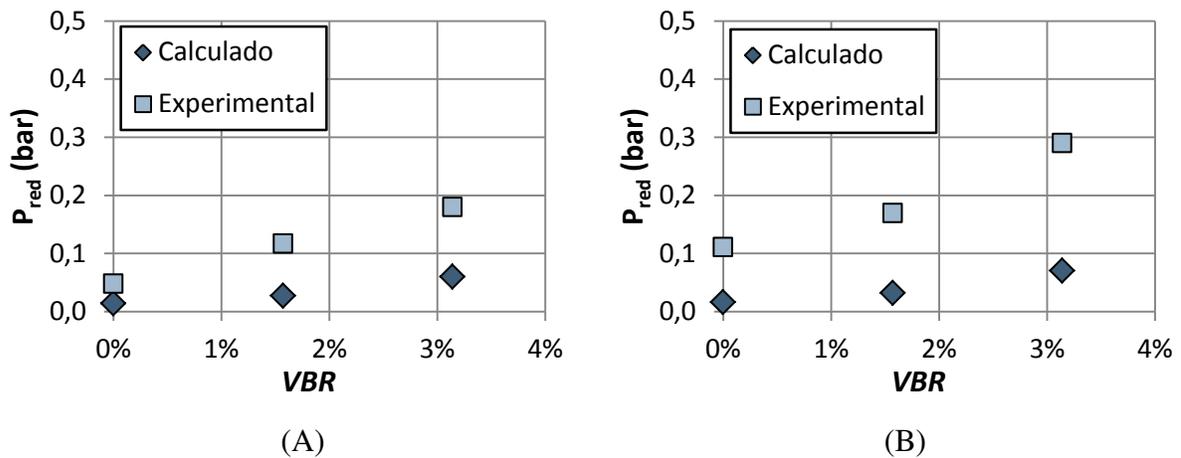


Figura 6.20: Gráficos da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo e os dados do experimento *SOLVEX* para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e para a mistura ar e propano estequiométrica (B).

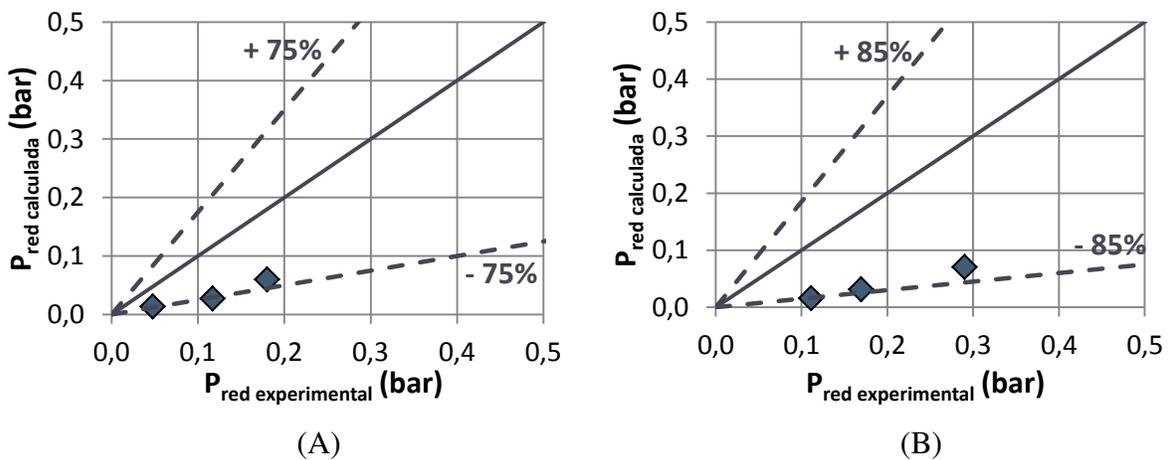


Figura 6.21: Gráficos de comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os dados do experimento *SOLVEX* em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}) para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e para a mistura propano e ar estequiométrica (B). As retas tracejadas representam desvio igual a + 75% e - 75% ou + 85% e - 85% e as retas contínuas representam desvio igual a zero.

Através da análise dos resultados dos gráficos das Figuras 6.20 A e 6.21 A para a mistura estequiométrica ar e metano é possível concluir que o modelo subestimou a sobrepressão para os três casos do experimento *SOLVEX* analisados (VBR igual a 0, 1,6 e 3,1%). Porém é válido ressaltar que os desvios obtidos ficaram acima da faixa de - 75%, o que não representa um resultado tão ruim, embora na área de segurança seja preferível utilizar um modelo que possua

uma abordagem mais conservadora, em outras palavras, um modelo que superestime a sobrepressão e não o contrário. Observando os resultados para a mistura estequiométrica ar e propano contidos nos gráficos das Figuras 6.20 B e 6.21 B, novamente o modelo subestimou a sobrepressão para os três casos do experimento *SOLVEX* analisados. Porém os desvios obtidos para a mistura ar e propano foram um pouco maiores, ficando acima da faixa de - 85%.

A princípio os desvios foram atribuídos ao fato de a correlação de ε (Equação 6.2) não ter apresentado um bom desempenho para todos os casos do experimento da *British Gas*, ou seja, se uma correlação melhor para ε tivesse sido desenvolvida, levando em conta o efeito de outras variáveis além de *VBR*, como *ABR*, por exemplo, talvez o modelo tivesse conseguido representar com mais exatidão a sobrepressão para o experimento *SOLVEX*. De fato, o valor de *ABR* para o *SOLVEX* é de 40% para os casos com obstruções, enquanto que o experimento da *British Gas* apresenta *ABR* igual a 20% para os casos com obstáculos, é uma diferença significativa que não está sendo levada em consideração na estimativa de ε . Para ilustrar a influência que essa diferença pode gerar nos resultados, basta analisar os valores de ε dos dois casos simulados no *FLACS* que possuem *VBR* igual a 1,5% (arranjos de número 4 e 6 da Tabela 5.3), o valor de ε para o caso com *ABR* igual a 24% foi cerca de duas vezes maior que para o caso com *ABR* igual a 16%. Portanto o desenvolvimento de uma correlação para ε em função de *VBR* e *ABR* é crucial para um melhor desempenho do modelo na estimativa da sobrepressão da explosão.

Porém mesmo que uma correlação adequada para ε seja desenvolvida, um bom desempenho do modelo não está garantido, já que, apesar de o experimento da *British Gas* e o da *Shell* apresentarem similaridades em alguns aspectos (ocorrem em uma câmara com *vent* e obstáculos cilíndricos, com ignição no lado oposto ao *vent*, e mistura estequiométrica de ar e combustível), eles apresentam certas diferenças geométricas relevantes. Por exemplo, no experimento *SOLVEX* o *vent* ocupa 50% da área da parede em que se encontra ($A_V/V^{2/3}$ igual a 0,41), já no da *British Gas*, o *vent* ocupa apenas 11% da área da parede ($A_V/V^{2/3}$ igual a 0,07), é uma diferença bastante significativa, que certamente exerce alguma influência sobre a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε), e que não está sendo considerada na correlação de ε , já que os valores de ε utilizados na criação da correlação foram obtidos para um valor de área de *vent* fixo ($A_V/V^{2/3}$ igual a 0,07). Portanto, caso $A_V/V^{2/3}$ exerça grande influência sobre ε , o modelo não será capaz de estimar satisfatoriamente a sobrepressão de uma explosão em uma

câmara com uma razão $A_V/V^{2/3}$ muito maior ou muito menor que a do experimento da *British Gas*. Para confirmar essa possibilidade, seria necessário realizar mais simulações no *FLACS*, mantendo os mesmos arranjos de tubos e aumentando a área do *vent*, de modo a obter um valor de $A_V/V^{2/3}$ igual ao do experimento *SOLVEX*, e com os resultados verificar se essa influência é realmente relevante.

Ainda com relação aos desvios obtidos, outro aspecto que também precisa ser considerado, é que algumas constantes do modelo BML que foram obtidas através da análise de dados experimentais e que foram fixadas neste trabalho baseando-se em dados de algumas referências, na verdade podem assumir certa faixa de valores. De acordo com Cant e Bray (1988), o fator de orientação $|\hat{\sigma}_y|$, que foi considerado igual a 0,5, na verdade pode variar entre $0 \leq |\hat{\sigma}_y| \leq 1$. E a constante g , que foi considerada igual a 2, pode estar contida no intervalo $1 \leq g \leq 2$. Além disso, outro aspecto que precisa ser levado em conta, é que a espessura da chama (δ) também foi fixada com base em algumas considerações. Posto isto, os parâmetros $|\hat{\sigma}_y|$, g e δ são considerados as principais incertezas do modelo, e podem estar afetando os resultados, portanto seria importante avaliar como o modelo se comporta diante de alterações no valor dessas variáveis. A subseção 6.2.2 apresenta os resultados referentes à avaliação das incertezas do modelo.

6.2.2 Avaliação das incertezas do modelo

A avaliação do comportamento do modelo com relação a alterações no valor da constante g e do fator de orientação $|\hat{\sigma}_y|$ (constantes da modelagem BML) foi realizada. A Figura 6.22 apresenta os gráficos da máxima sobrepressão da explosão em função da razão de bloqueio de volume para quatro valores diferentes da constante g , juntamente com os dados experimentais do *SOLVEX* tanto para a mistura metano e ar quanto para a mistura propano e ar, ambas estequiométricas. E com a intenção de analisar a influência de $|\hat{\sigma}_y|$, a Figura 6.23 exhibe os mesmos gráficos só que para quatro valores diferentes da constante $|\hat{\sigma}_y|$, para as mesmas misturas estequiométricas.

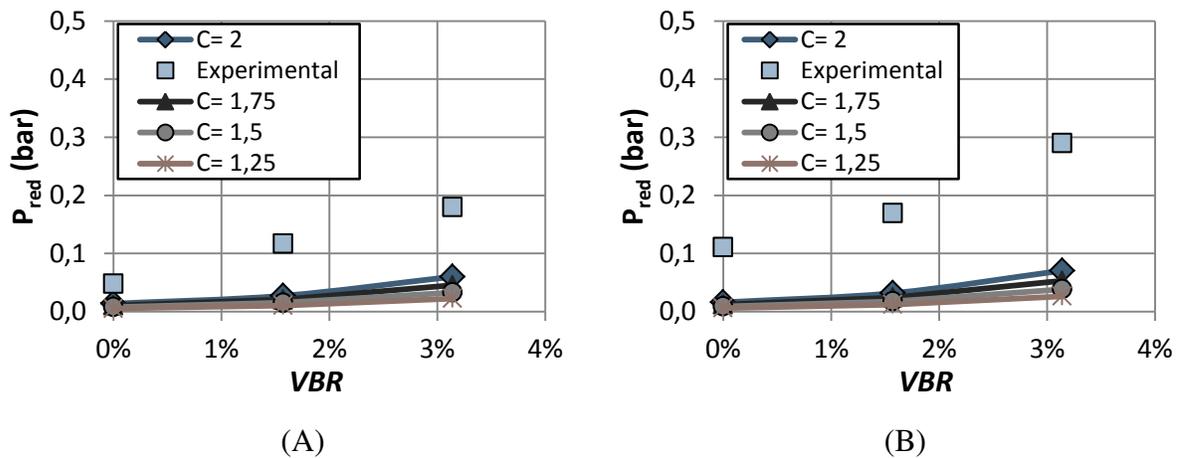


Figura 6.22: Gráficos da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando quatro valores diferentes da constante g e os dados do experimento *SOLVEX* para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e para a mistura ar e propano estequiométrica (B). As curvas $C=2$ representam os resultados para o valor de g adotado para o modelo proposto.

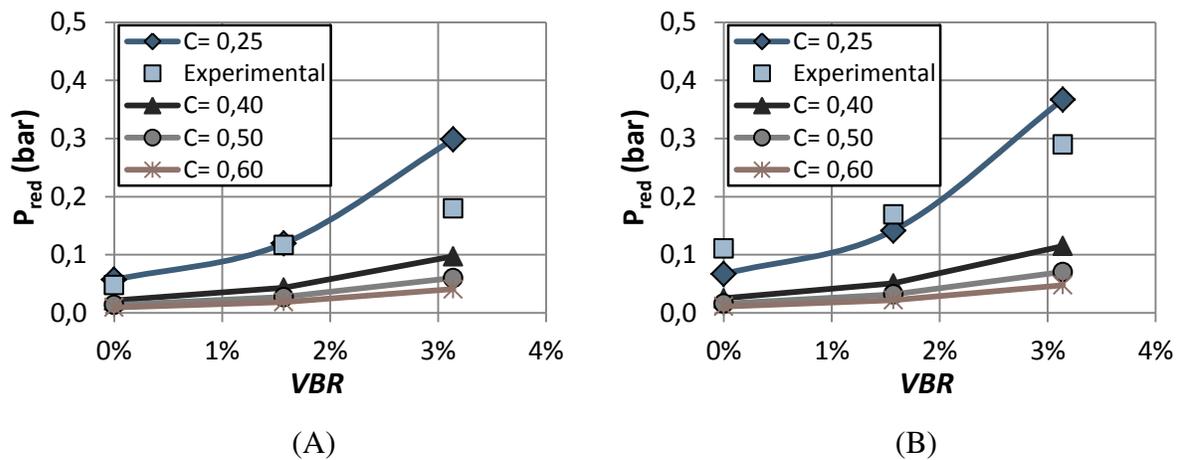


Figura 6.23: Gráficos da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando quatro valores diferentes da constante $|\hat{\delta}_y|$ e os dados do experimento *SOLVEX* para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e para a mistura ar e propano estequiométrica (B). As curvas $C=0,5$ representam os resultados para o valor de $|\hat{\delta}_y|$ adotado para o modelo proposto.

Observando os resultados dos gráficos da Figura 6.22 é possível ver que as modificações no valor da constante g dentro da faixa permitida ($1 \leq g \leq 2$) não alteraram muito os resultados

para o experimento *SOLVEX*, tanto para a mistura metano e ar quanto para a mistura propano e ar.

Porém, analisando os resultados dos gráficos da Figura 6.23 é possível verificar que variações no valor do fator de orientação ($|\hat{\sigma}_y|$) dentro da faixa permitida ($0 \leq |\hat{\sigma}_y| \leq 1$) chegaram a exercer grande influência no resultado final do modelo para as duas misturas ar e combustível analisadas. É possível notar também que utilizando um valor de $|\hat{\sigma}_y|$ menor que 0,5 o desempenho do modelo neste experimento pode ser melhorado. A Figura 6.24 apresenta os gráficos da máxima sobrepressão da explosão em função da razão de bloqueio de volume para o modelo proposto utilizando os valores de $|\hat{\sigma}_y|$ que fizeram o modelo melhor se ajustar aos dados experimentais (valores de $|\hat{\sigma}_y|$ que minimizaram a soma dos quadrados das diferenças entre o valor calculado e o experimental).

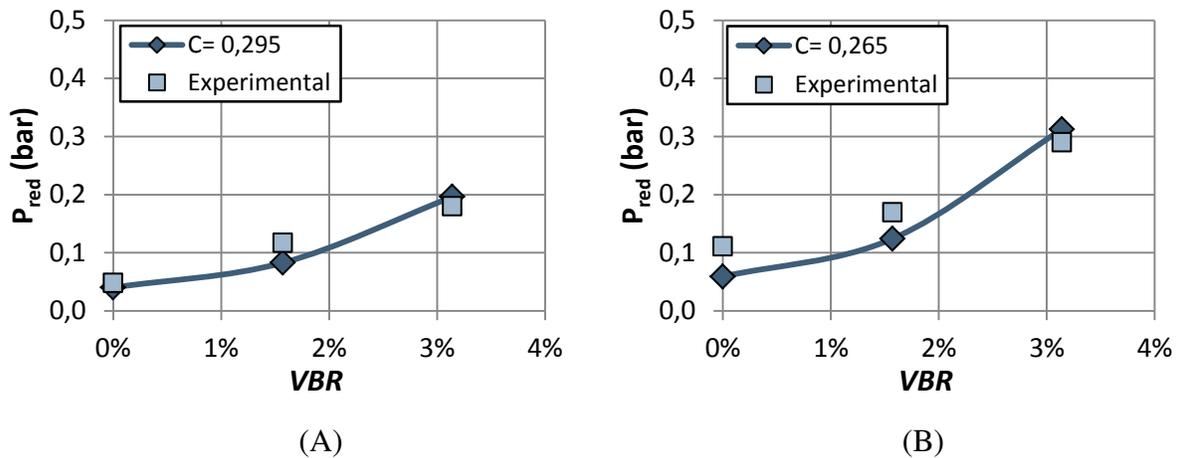


Figura 6.24: Gráficos da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando os valores da constante $|\hat{\sigma}_y|$ que proporcionaram os melhores ajustes aos dados do experimento *SOLVEX* para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e para a mistura ar e propano estequiométrica (B).

Analisando os resultados dispostos na Figura 6.24 foi possível constatar que alterando o valor de $|\hat{\sigma}_y|$ para a mistura metano e ar de 0,5 para 0,295, o modelo passou a representar melhor as sobrepressões do experimento *SOLVEX*, com desvios dentro da faixa +10 a -30% (Figura 6.25 A). Para mistura propano e ar, o mesmo comportamento foi observado quando a constante foi alterada de 0,5 para 0,265, com desvios dentro da faixa +10 a -50% (Figura 6.25 B).

Como as alterações no valor do fator de orientação ($|\hat{\sigma}_y|$) dentro da faixa permitida exerceram grande influência nos resultados do modelo, seria interessante realizar um estudo mais profundo com relação a esse parâmetro, apesar de vários autores, como Bray (1990), Bray e Cant (1991) e Abu-orf e Cant (2000), terem utilizado o mesmo valor para essa constante (0,5). Porém seria mais pertinente realizar esse estudo após o desenvolvimento de uma correlação mais adequada para ε , já que o desempenho não adequado da correlação pode estar potencializando o efeito dessa variável nos resultados.

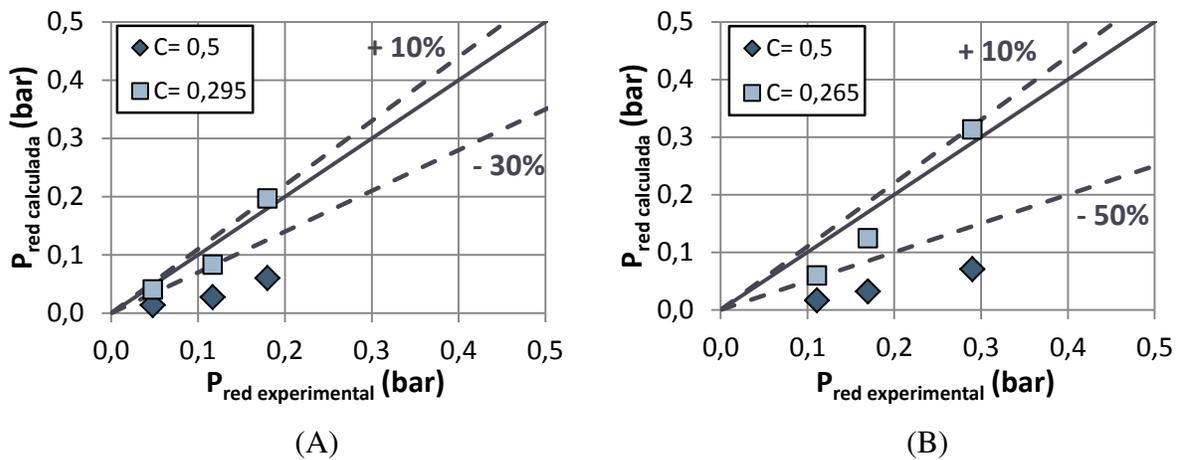


Figura 6.25: Gráficos de comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os dados do experimento *SOLVEX* em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}), resultados obtidos para $|\hat{\sigma}_y|$ igual a 0,5 e 0,295 para a mistura metano e ar estequiométrica (A) e resultados obtidos para $|\hat{\sigma}_y|$ igual a 0,5 e 0,265 para a mistura propano e ar estequiométrica (B). As retas tracejadas representam desvio igual a + 10% e - 30% ou + 10% e -50%, e as retas contínuas representam desvio igual a zero.

Com a finalidade de demonstrar o comportamento do modelo diante de alterações no valor da espessura da chama (δ), a Figura 6.26 apresenta os gráficos da máxima sobrepressão da explosão em função da razão de bloqueio de volume para quatro valores diferentes de δ , juntamente com os dados experimentais do *SOLVEX* para as misturas ar e metano e ar e propano estequiométricas.

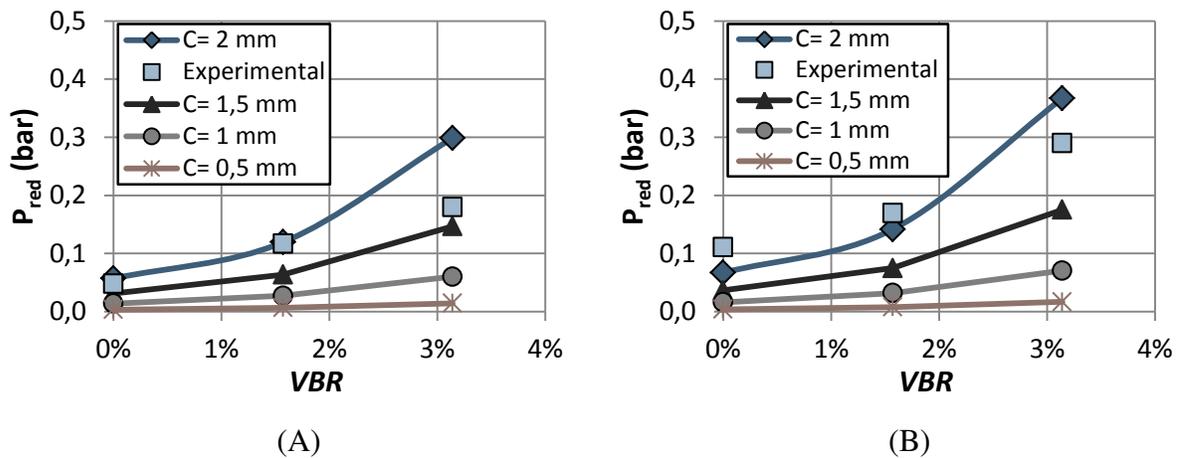
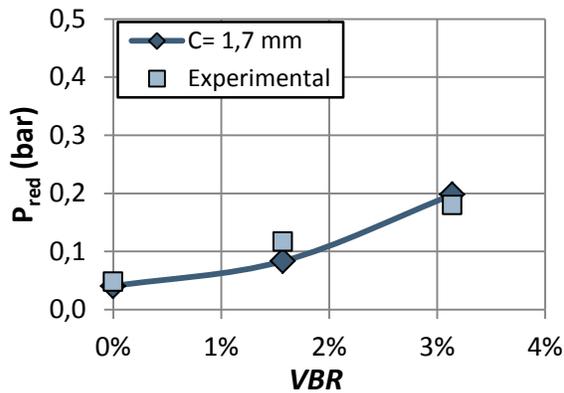


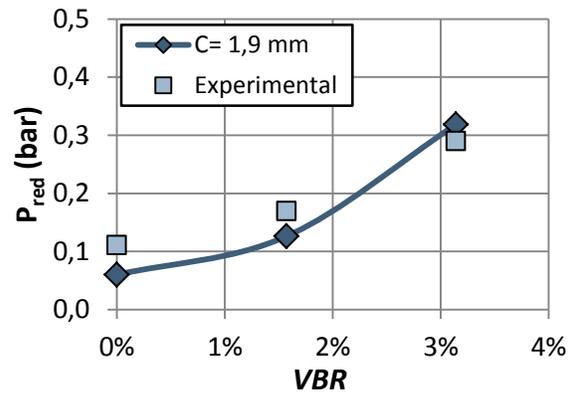
Figura 6.26: Gráficos da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando quatro valores diferentes de δ e os dados do experimento *SOLVEX* para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e para a mistura ar e propano estequiométrica (B). As curvas $C=1$ mm representam os resultados para o valor de δ adotado para o modelo proposto.

Através da análise dos resultados dos gráficos da Figura 6.26 é possível verificar que variações no valor da espessura da chama (δ) também exerceram grande influência no resultado final do modelo para as duas misturas analisadas. E também é possível notar que utilizando um valor de δ maior que 1 mm o desempenho do modelo neste experimento pode ser melhorado. A Figura 6.27 apresenta os gráficos da máxima sobrepressão da explosão em função da razão de bloqueio de volume para o modelo proposto utilizando os valores de δ que fizeram o modelo melhor se ajustar aos dados experimentais.

Observando os resultados dispostos nos gráficos da Figura 6.27 foi possível verificar que alterando o valor de δ para a mistura metano e ar de 1 para 1,7 mm, o modelo passou a representar melhor as sobrepressões do experimento *SOLVEX*, com desvios dentro da faixa +10 a -30% (Figura 6.28 A). Quando o valor de δ foi alterado de 1 para 1,9 mm para mistura propano e ar, o mesmo comportamento foi observado, e os desvios obtidos ficaram dentro da faixa +10 a -50% (Figura 6.28 B).

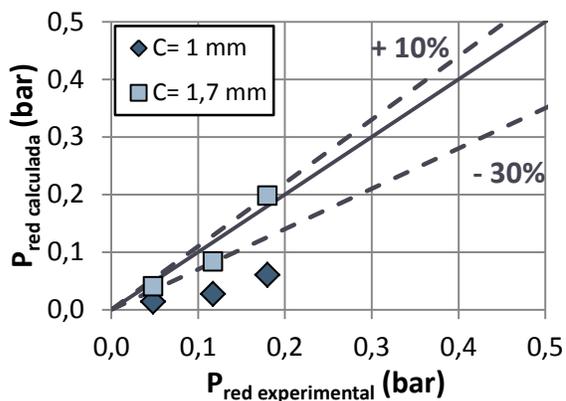


(A)

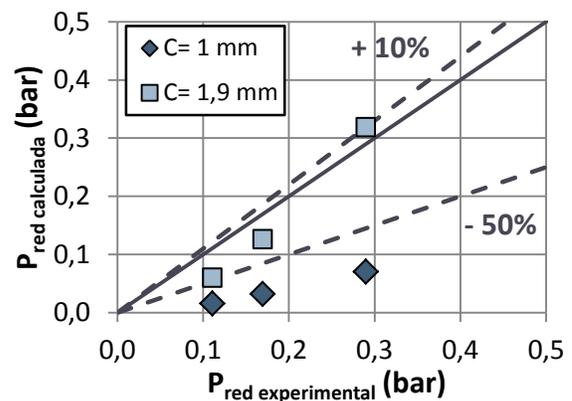


(B)

Figura 6.27: Gráficos da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando os valores de espessura da chama que proporcionaram os melhores ajustes aos dados do experimento *SOLVEX* para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e para a mistura ar e propano estequiométrica (B).



(A)



(B)

Figura 6.28: Gráficos de comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os dados do experimento *SOLVEX* em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}), resultados obtidos para δ igual a 1 e 1,7 mm para a mistura ar e metano estequiométrica (A) e resultados obtidos para δ igual a 1 e 1,9 mm para a mistura ar e propano estequiométrica (B). As retas tracejadas representam desvio igual a + 10% e - 30% ou a + 10% e - 50%, e as retas contínuas representam desvio igual a zero.

Como as alterações feitas no valor da espessura da chama (δ) exerceram grande influência nos resultados do modelo proposto, seria interessante fazer um estudo mais detalhado sobre a modelagem desse parâmetro, já que existe uma série de definições diferentes para o mesmo, e não há um consenso geral sobre a forma mais adequada de modelá-lo. Contudo seria mais

apropriado dar prioridade ao desenvolvimento de uma correlação mais adequada para ε , uma vez que o desempenho não adequado da correlação pode estar intensificando o efeito dessa variável nos resultados.

6.2.3 Verificação do regime em que se encontra a chama

A verificação do regime em que se encontra a chama também foi realizada para o experimento *SOLVEX*. Para isso, os números adimensionais de Damköhler (Da), Karlovitz (Ka) e Reynolds turbulento (Re_t) foram estimados utilizando as correlações de ε e k (Equações 6.2 e 6.3). Os resultados obtidos foram dispostos no diagrama de Borghi modificado com duas retas adicionais em azul, Damköhler (Da) igual a um e Karlovitz (Ka) igual a dez, com a finalidade de facilitar o entendimento dos resultados. A Figura 6.29 exibe o diagrama com os resultados para a mistura ar e metano e a Figura 6.30 apresenta os resultados para a mistura ar e propano.

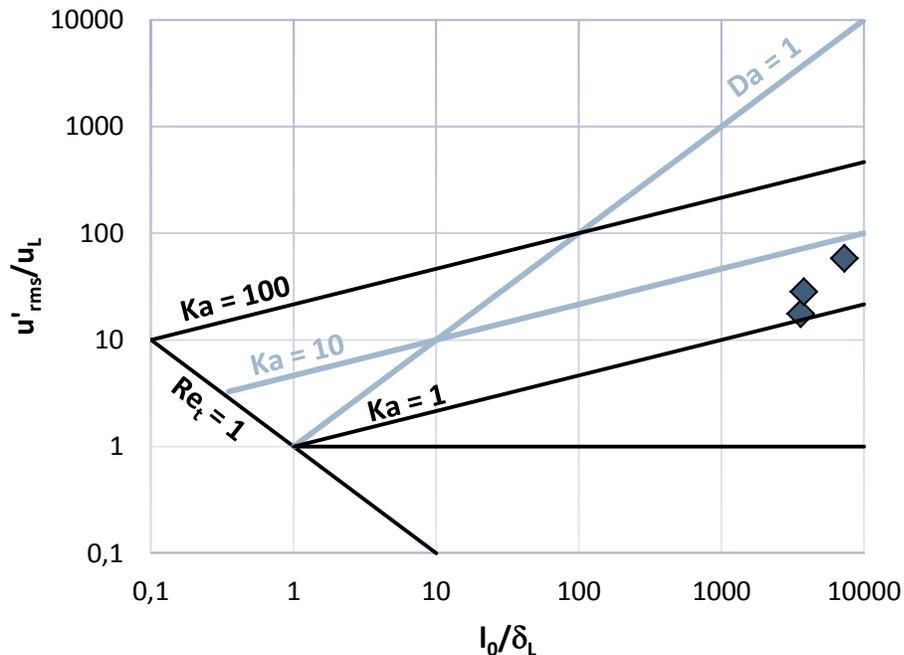


Figura 6.29: Resultados obtidos dispostos no Diagrama de Borghi modificado para a mistura ar e metano estequiométrica.

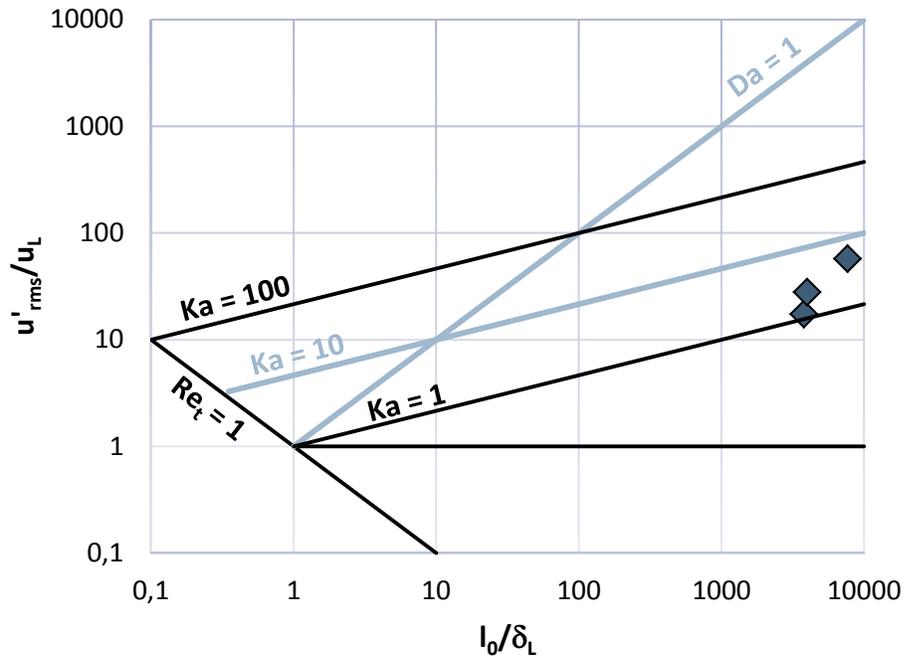


Figura 6.30: Resultados obtidos dispostos no Diagrama de Borghi modificado para a mistura ar e propano estequiométrica.

Para que a chama possa estar no regime *flamelet*, os seguintes critérios precisam ser satisfeitos: $Da \gg 1$, $Ka < 1$ e $Re_t > 1$. Mas como já argumentado na subseção 6.1.6, o critério de $Ka < 1$ poderia muito bem alterado para $Ka < 10$. Tendo isso em mente, analisando os resultados para as misturas ar e metano e ar e propano, Figura 6.29 e Figura 6.30 respectivamente, é possível verificar que todos os pontos se encontram na região Damköhler maior que um, que está localizada abaixo da reta $Da = 1$, e como eles estão bem distantes dessa reta, o número de Damköhler é realmente muito maior que um. Esses pontos também se encontram na região de Reynolds turbulento maior que um, que está posicionada acima da reta $Re_t = 1$. E finalmente todos os pontos estão localizados abaixo da reta $Ka = 10$, que é a região de número de Karlovitz menor que 10. Portanto os três critérios foram satisfeitos para as duas misturas e com isso é possível considerar que a chama se encontra no regime *flamelet*, e, por conseguinte, o significado físico do modelo foi mantido para os dois casos analisados.

No entanto é fundamental salientar que os resultados obtidos estão suscetíveis ao desempenho das correlações de ε e k , que por sua vez não estão representando da melhor

maneira possível o comportamento da energia cinética turbulenta (k) e da sua taxa de dissipação (ε).

6.3 RESULTADOS PARA O EXPERIMENTO DA DNV

6.3.1 Resultados iniciais

O modelo modificado (Equação 6.4) foi utilizado na estimativa das sobrepressões máximas do experimento da *DNV*. A Figura 6.31 apresenta os resultados de máxima sobrepressão da explosão em função da razão de bloqueio de volume, juntamente com os dados experimentais. E a Figura 6.32 exibe uma comparação entre os resultados do modelo e os dados experimentais. Os resultados em questão foram obtidos utilizando os dados de entrada do modelo que foram estabelecidos na seção 5.2.

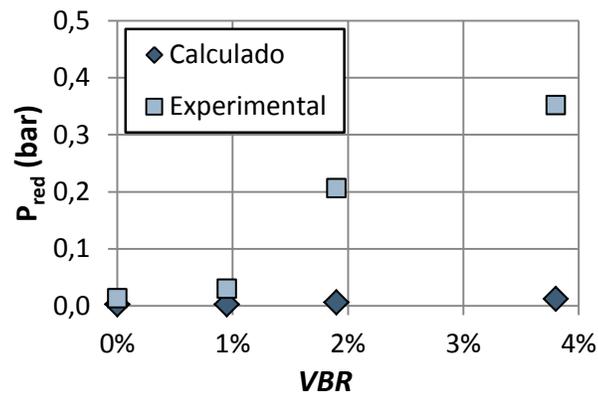


Figura 6.31: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo e os dados do experimento da *DNV*.

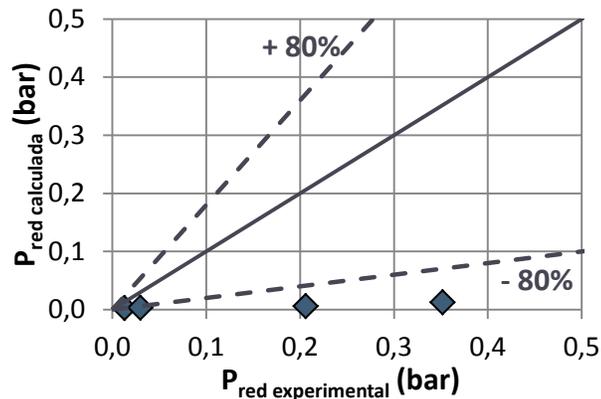


Figura 6.32: Gráfico de comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os dados do experimento da *DNV* em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}). As retas tracejadas representam desvio igual a + 80% ou - 80% e a reta contínua representa desvio igual a zero.

Analisando os resultados do gráfico da Figura 6.31 é possível verificar que o modelo subestimou a sobrepressão para os quatro casos analisados e o menor desvio obtido foi da ordem de - 80% (Figura 6.32), ou seja, o modelo não conseguiu representar o comportamento da sobrepressão para o experimento da *DNV*, e apresentou um desempenho muito pior que para o experimento *SOLVEX*. Esses dois experimentos apresentam valores altos da razão de bloqueio de área (*ABR*), valores por sua vez são maiores que o do experimento da *British Gas* (*ABR* igual a 20%), e uma vez que o efeito dessa variável não foi incluído na correlação de ε , um bom desempenho já não era esperado, já que como observado anteriormente (subseção 6.2.1), *ABR* exerce bastante influência em ε . Como o valor de *ABR* para o experimento da *DNV* (44%) é maior que o do *SOLVEX* (40%), e para um mesmo valor de *VBR* quanto maior o valor de *ABR*, maior o valor de ε , os valores de ε calculados pela correlação para o experimento da *DNV* foram ainda mais subestimados que os do *SOLVEX*, o que justifica o pior desempenho para o primeiro experimento.

Novamente, um melhor desempenho do modelo está diretamente ligado ao desenvolvimento de uma correlação para ε em função de *VBR* e *ABR*. Entretanto, mesmo que uma correlação adequada para ε seja desenvolvida, um bom desempenho do modelo não está garantido, devido à diferença bastante considerável entre os valores de $A_V/V^{2/3}$ dos experimentos da *DNV* e da *British Gas*. O experimento da *DNV* possui um *vent* que ocupa 100% da área da parede que o contém ($A_V/V^{2/3}$ igual a 0,82), e como a correlação de ε foi obtida para

um valor de área de *vent* fixo e bem menor ($A_V/V^{2/3}$ igual 0,07), caso $A_V/V^{2/3}$ realmente exerça grande influência em ε , o modelo não será capaz de estimar satisfatoriamente a sobrepressão de uma explosão em uma câmara com uma razão $A_V/V^{2/3}$ tão alta como a da *DNV*. O procedimento para confirmar essa suposição foi apresentado na subseção 6.2.1. Caso a influência de $A_V/V^{2/3}$ em ε seja realmente relevante, uma possível alternativa para levar o seu efeito em conta seria desenvolver mais de uma correlação para ε em função de *VBR* e *ABR*, cada uma válida para certa faixa de valor da razão $A_V/V^{2/3}$. Para isso seria necessário realizar mais simulações no *FLACS* para os mesmos arranjos de tubos, alterando a área do *vent* de forma sistemática.

6.3.2 Avaliação das incertezas do modelo

Novamente, o comportamento do modelo com relação a alterações no valor da constante g e do fator de orientação $|\hat{\sigma}_y|$ (constantes da modelagem BML) foi avaliado. A Figura 6.33 apresenta o gráfico da máxima sobrepressão da explosão em função da razão de bloqueio de volume para quatro valores diferentes da constante g , juntamente com os dados experimentais da *DNV*. Já a Figura 6.34, expõe o mesmo gráfico só que para quatro valores diferentes da constante $|\hat{\sigma}_y|$.

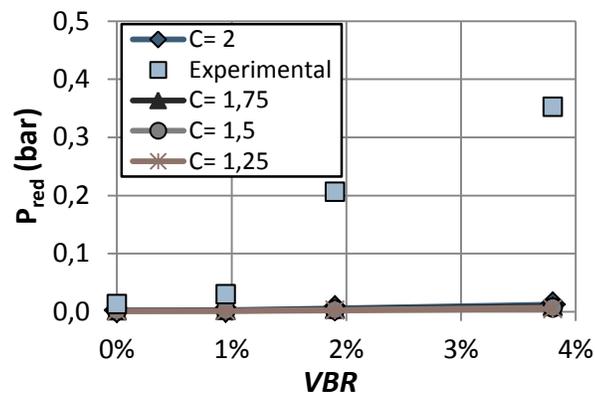


Figura 6.33: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (*VBR*), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando quatro valores diferentes da constante g e os dados do experimento da *DNV*. A curva $C=2$ representa os resultados para o valor de g adotado para o modelo proposto.

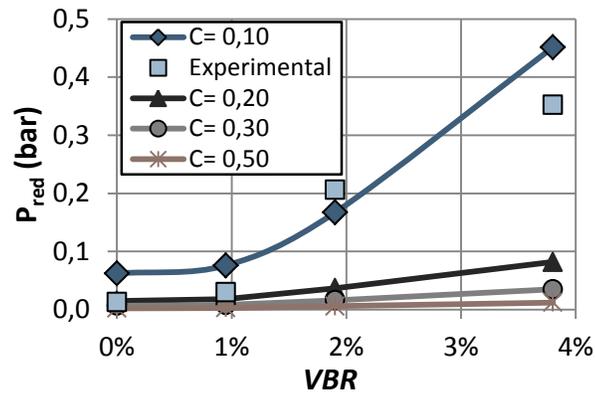


Figura 6.34: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando quatro valores diferentes da constante $|\hat{\sigma}_y|$ e os dados do experimento da *DNV*. A curva $C=0,5$ representa os resultados para o valor de $|\hat{\sigma}_y|$ adotado para o modelo proposto.

Através da análise dos resultados do gráfico da Figura 6.33 é possível notar que as modificações no valor da constante g dentro da faixa permitida ($1 \leq g \leq 2$) praticamente não alteraram os resultados do modelo para o experimento da *DNV*.

Entretanto, analisando os resultados do gráfico da Figura 6.34 é possível constatar que mudanças no valor do fator de orientação ($|\hat{\sigma}_y|$) dentro da faixa permitida ($0 \leq |\hat{\sigma}_y| \leq 1$) exerceram grande influência no resultado final do modelo. É possível perceber também que utilizando um valor de $|\hat{\sigma}_y|$ menor que 0,5 o desempenho do modelo neste experimento pode ser melhorado, e para exemplificar esse fato, a Figura 6.35 apresenta o gráfico da máxima sobrepressão da explosão em função da razão de bloqueio de volume para o modelo proposto utilizando o valor de $|\hat{\sigma}_y|$ que fez o modelo melhor se ajustar aos dados experimentais.

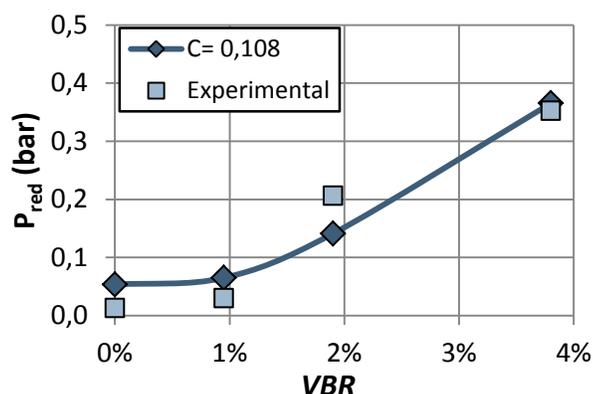


Figura 6.35: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando o valor da constante $|\hat{\sigma}_y|$ que proporcionou o melhor ajuste aos dados do experimento da *DNV*.

Examinado os resultados apresentados na Figura 6.35 foi possível verificar que alterando o valor de $|\hat{\sigma}_y|$ de 0,5 para 0,108, o modelo passou a representar melhor as sobrepressões do experimento da *DNV* para os casos com obstruções, com desvios dentro da faixa + 120 a -35% (Figura 6.36). Também foi possível notar que o valor de $|\hat{\sigma}_y|$ que fez o modelo melhor se ajustar aos dados experimentais da *DNV* (0,108) é bem menor que os valores de $|\hat{\sigma}_y|$ que foram obtidos para o experimento *SOLVEX* (0,295 para a mistura ar e metano e 0,265 para a mistura ar e propano).

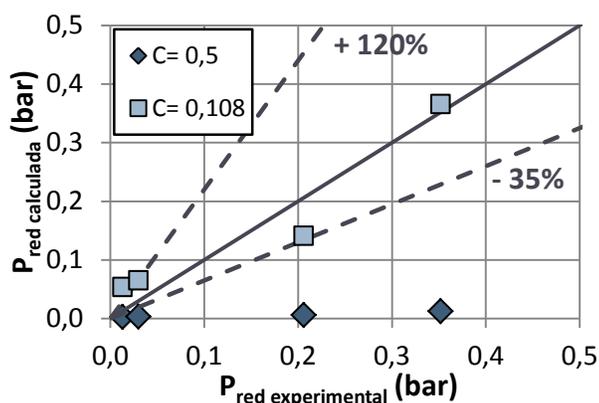


Figura 6.36: Gráfico de comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os dados do experimento da *DNV* em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}), resultados obtidos para $|\hat{\sigma}_y|$ igual a 0,5 e 0,108. As retas tracejadas representam desvio igual a + 120% e - 35%, e a reta contínua representa desvio igual a zero.

Com o intuito de avaliar o comportamento do modelo diante de modificações no valor da espessura da chama (δ), a Figura 6.37 apresenta os gráficos da máxima sobrepressão da explosão em função da razão de bloqueio de volume para quatro valores diferentes de δ , juntamente com os dados do experimento da *DNV*.

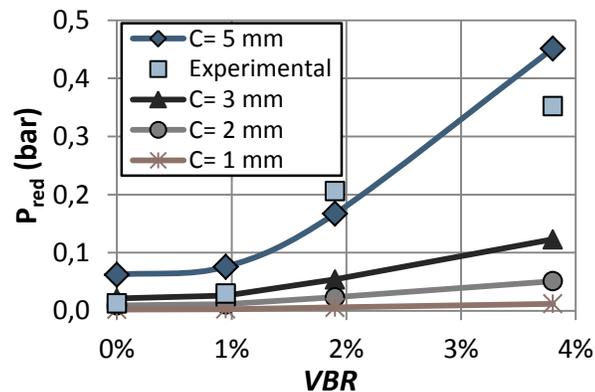


Figura 6.37: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando quatro valores diferentes de δ e os dados do experimento da *DNV*. A curva $C=1$ mm representa os resultados para o valor de δ adotado para o modelo proposto.

De acordo com os resultados do gráfico da Figura 6.37 é possível constatar que variações no valor da espessura da chama (δ) exerceram grande influência no resultado final do modelo. Além disso, é possível notar que o desempenho do modelo neste experimento pode ser melhorado utilizando um valor de δ maior que 1 mm. Com o intuito de ilustrar essa questão, a Figura 6.38 apresenta o gráfico da máxima sobrepressão da explosão em função da razão de bloqueio de volume para o modelo proposto utilizando o valor de δ que fez o modelo melhor se ajustar aos dados experimentais.

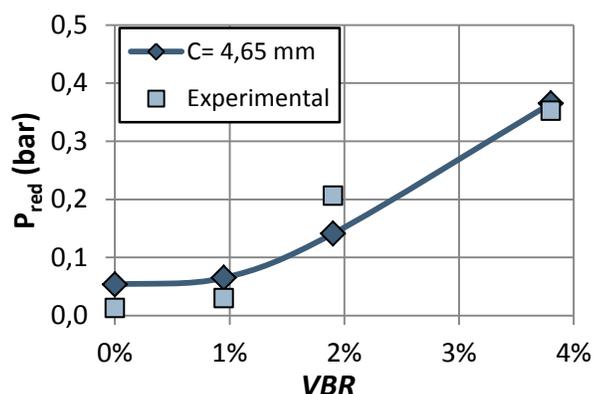


Figura 6.38: Gráfico da sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) em função da razão de bloqueio de volume (VBR), comparação entre os resultados obtidos com o modelo utilizando o valor da espessura da chama (δ) que proporcionou o melhor ajuste aos dados do experimento da *DNV*.

Através da análise dos resultados contidos no gráfico da Figura 6.38 foi possível verificar que alterando o valor de δ de 1 para 4,65 mm, o modelo passou a representar melhor as sobrepressões do experimento da *DNV* para os casos com obstáculos, com desvios dentro da faixa + 120 a -35% (Figura 6.39). Além disso, foi possível notar que o valor de δ que fez o modelo melhor se ajustar aos dados experimentais da *DNV* (4,65 mm) é bem maior que os valores de δ que foram obtidos para o experimento *SOLVEX* (1,7 mm para a mistura ar e metano e 1,9 mm para a mistura ar e propano).

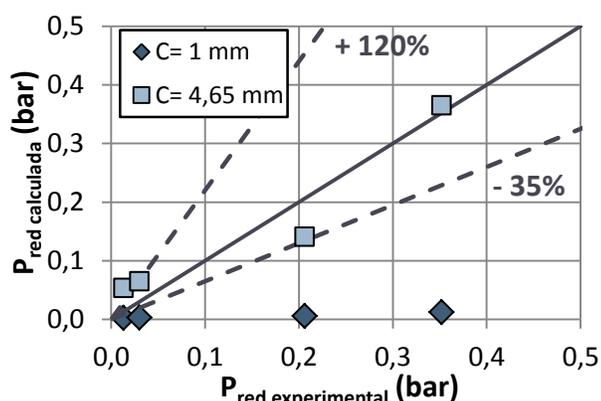


Figura 6.39: Gráfico de comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os dados do experimento da *DNV* em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}), resultados obtidos para δ igual a 1 e 4,65 mm. As retas tracejadas representam desvio igual a + 120% e - 35%, e a reta contínua representa desvio igual a zero.

6.3.3 Verificação do regime em que se encontra a chama

Para a verificação do regime em que se encontra a chama para o experimento da *DNV*, novamente os números adimensionais de Damköhler (Da), Karlovitz (Ka) e Reynolds turbulento (Re_t) foram estimados utilizando as correlações de ε e k (Equações 6.2 e 6.3). Os resultados obtidos são apresentados na Figura 6.40, e foram dispostos no diagrama de Borghi modificado com duas retas adicionais em azul, Damköhler (Da) igual a um e Karlovitz (Ka) igual a dez, com o intuito de facilitar a compreensão dos resultados.

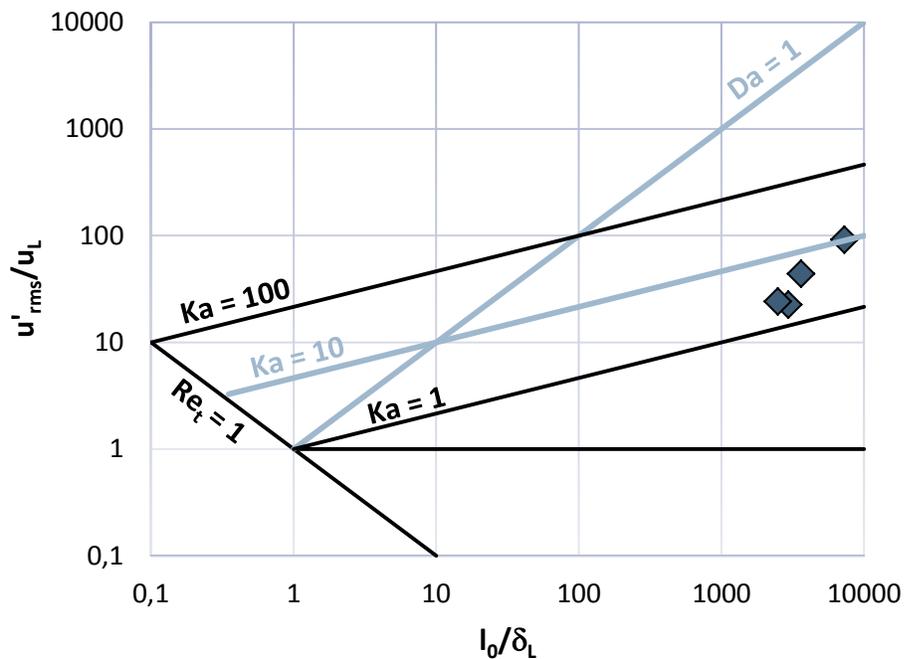


Figura 6.40: Resultados obtidos dispostos no Diagrama de Borghi modificado.

Através da análise dos os resultados apresentados no gráfico da Figura 6.40 é possível constatar que o significado físico do modelo foi mantido, já que os três critérios que determinam que a chama se encontra no regime *flamelet* foram satisfeitos (ver subseção 6.1.6), ou seja, todos os pontos se encontram na região Damköhler muito maior que um, Karlovitz menor que dez, e Reynolds turbulento maior que um. Entretanto é importante ressaltar que os resultados obtidos estão atrelados ao desempenho das correlações de ε e k , que por sua vez não estão representando

da melhor maneira possível o comportamento da energia cinética turbulenta (k) e da sua taxa de dissipação (ϵ).

6.4 COMPARAÇÃO COM MODELOS EXISTENTES

O desempenho do modelo modificado (Equação 6.4) em prever a sobrepressão máxima de uma explosão de gás foi comparado ao de outros modelos empíricos e semi-empíricos já existentes. Os modelos utilizados na comparação não são sensíveis à presença de obstáculos, e, portanto, somente o caso de explosão na câmara sem obstruções foi avaliado. A Figura 6.41 expõe os resultados da comparação em termos de máxima sobrepressão da explosão para o experimento da *British Gas*, já a Figura 6.42 apresenta os mesmos resultados para a mistura metano e ar estequiométrica do experimento *SOLVEX*, a Figura 6.43 exhibe os resultados para a mistura propano e ar estequiométrica do experimento *SOLVEX* e finalmente, a Figura 6.44 expõe os resultados para o experimento da *DNV*.

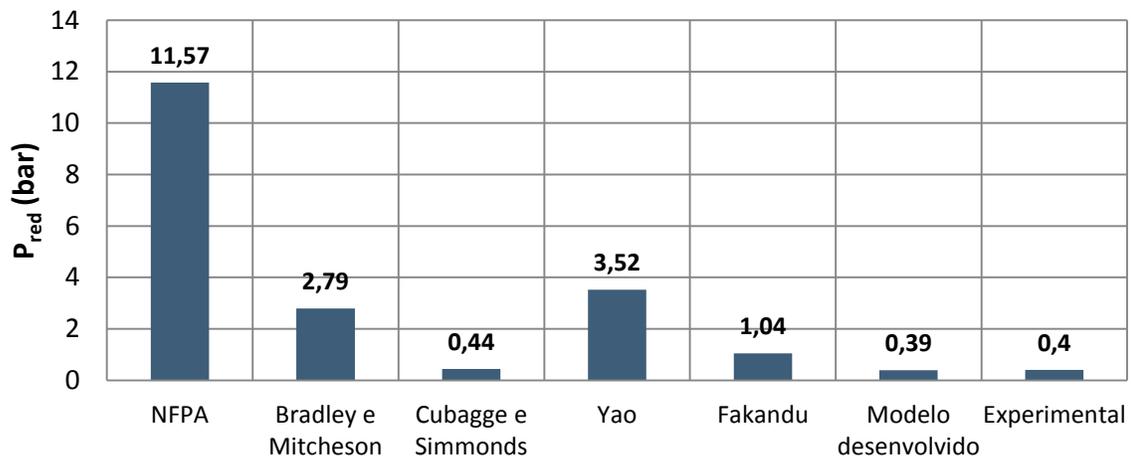


Figura 6.41: Comparação entre os resultados obtidos com os modelos existentes e com o modelo desenvolvido em termos de sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) para o caso da câmara vazia do experimento da *British Gas*.

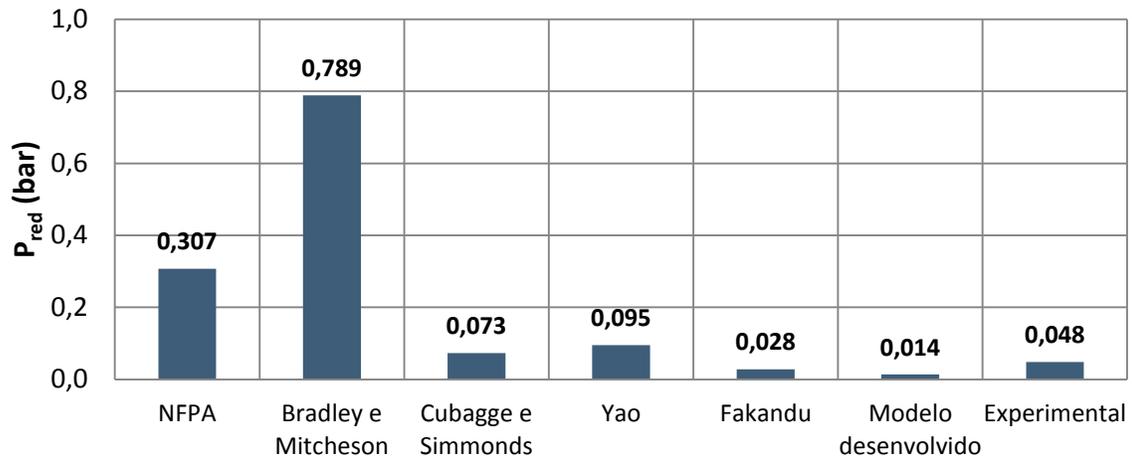


Figura 6.42: Comparação entre os resultados obtidos com os modelos existentes e com o modelo desenvolvido em termos de sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) para o caso da câmara vazia e mistura ar e metano estequiométrica do experimento *SOLVEX*.

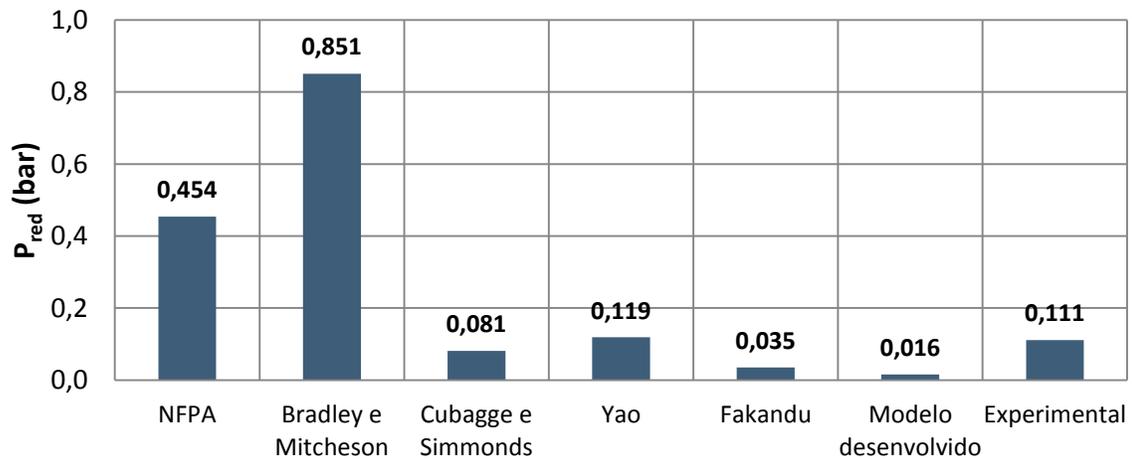


Figura 6.43: Comparação entre os resultados obtidos com os modelos existentes e com o modelo desenvolvido em termos de sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) para o caso da câmara vazia e mistura ar e propano estequiométrica do experimento *SOLVEX*.

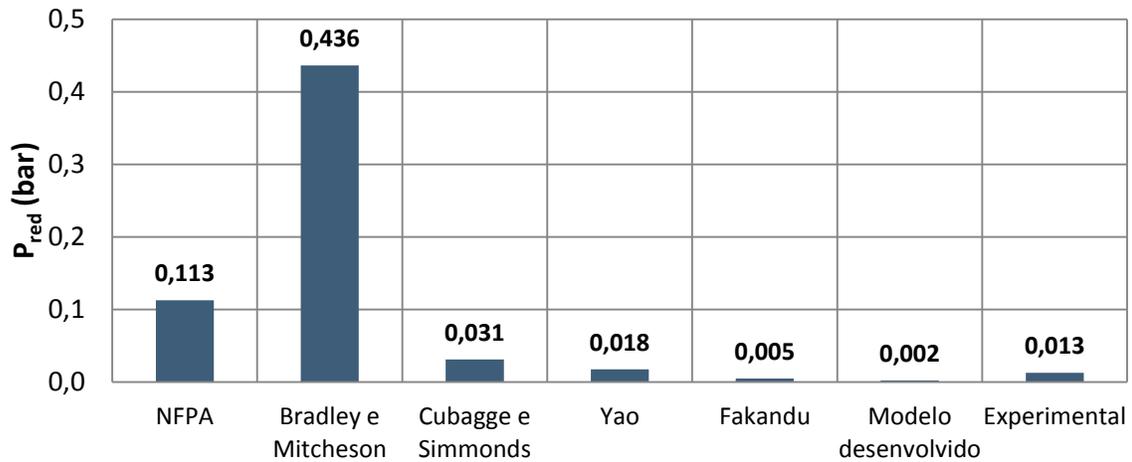


Figura 6.44: Comparação entre os resultados obtidos com os modelos existentes e com o modelo desenvolvido em termos de sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) para o caso da câmara vazia do experimento da *DNV*.

Analisando o gráfico da Figura 6.41 é possível verificar que o modelo desenvolvido foi o que melhor representou a sobrepressão máxima da explosão no caso da câmara vazia do experimento da *British Gas*, apresentando o menor desvio. Entretanto, tanto para o experimento *SOLVEX* quanto para o da *DNV*, o modelo proposto não obteve o menor desvio, uma vez que não apresentou um desempenho tão bom para esses experimentos. Para o caso *SOLVEX* com a mistura ar e metano (Figura 6.42), o menor desvio foi obtido pelo modelo de Fakandu *et al.* (2011). Para o *SOLVEX* com propano e ar (Figura 6.43), o melhor resultado foi o obtido pelo modelo de Yao (1974) *apud* Razus e Krause (2001), que também obteve o menor desvio para o experimento da *DNV* (Figura 6.44).

Entretanto, quando o fator de orientação ($|\hat{\sigma}_y|$), que é tido como uma das incertezas do modelo, foi alterado dentro da faixa permitida ($0 \leq |\hat{\sigma}_y| \leq 1$) de modo a fazer o modelo melhor se ajustar aos dados experimentais, o desempenho do modelo desenvolvido foi modificado tanto para o experimento da *Shell* quanto para o da *DNV*, como apresentado nas subseções 6.2.2 e 6.3.2. As Figuras 6.45, 6.46 e 6.47 apresentam os resultados do modelo desenvolvido, do modelo desenvolvido ajustado, e do modelo existente que apresentou o melhor desempenho em relação aos outros existentes, em termos de máxima sobrepressão da explosão para os experimentos *SOLVEX* metano, *SOLVEX* propano e *DNV*, respectivamente.

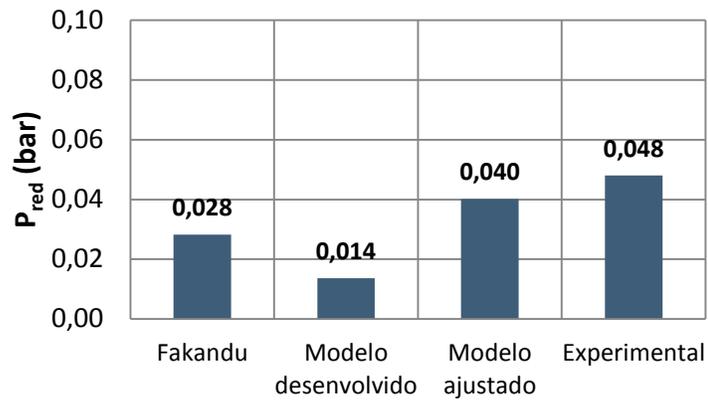


Figura 6.45: Comparação entre os resultados obtidos com o modelo de Fakandu, o modelo desenvolvido e o modelo desenvolvido ajustado, em termos de sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) para o caso da câmara vazia e mistura ar e metano estequiométrica do experimento *SOLVEX*.

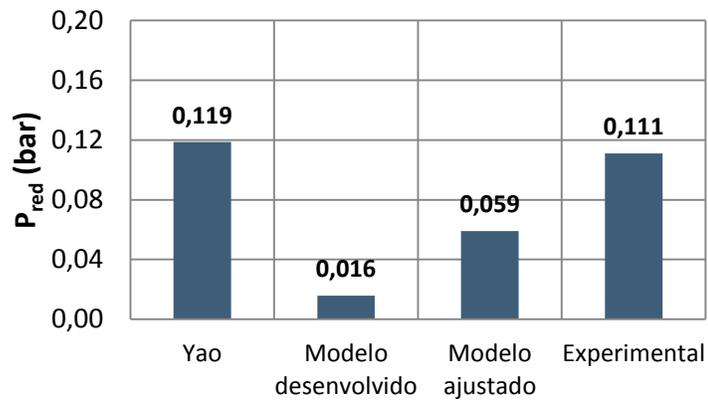


Figura 6.46: Comparação entre os resultados obtidos com o modelo de Yao, o modelo desenvolvido e o modelo desenvolvido ajustado, em termos de sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) para o caso da câmara vazia e mistura ar e propano estequiométrica do experimento *SOLVEX*.

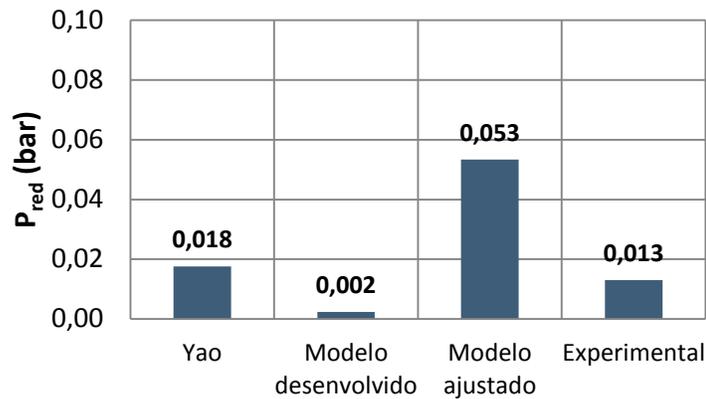


Figura 6.47: Comparação entre os resultados obtidos com o modelo de Yao, o modelo desenvolvido e o modelo desenvolvido ajustado, em termos de sobrepressão máxima da explosão (P_{red}) para o caso da câmara vazia do experimento da *DNV*.

Analisando os resultados das Figuras 6.45, 6.46 e 6.47, é possível observar que após o ajuste da constante $|\hat{\sigma}_y|$ o modelo passou a apresentar o menor desvio para o caso do experimento *SOLVEX* com a mistura ar e metano estequiométrica. Nos outros dois casos os desvios do modelo de Yao continuaram sendo os menores, mas como os valores de sobrepressão para esses dois casos são muito baixos, a diferença entre os valores dos desvios do modelo ajustado e do modelo de Yao é de pouca relevância do ponto de vista de engenharia.

A Figura 6.48 exibe uma comparação entre os resultados de máxima sobrepressão calculados com os modelos e os valores de sobrepressão experimentais, com o intuito de facilitar a visualização do desempenho geral dos modelos nos três conjuntos de dados experimentais analisados.

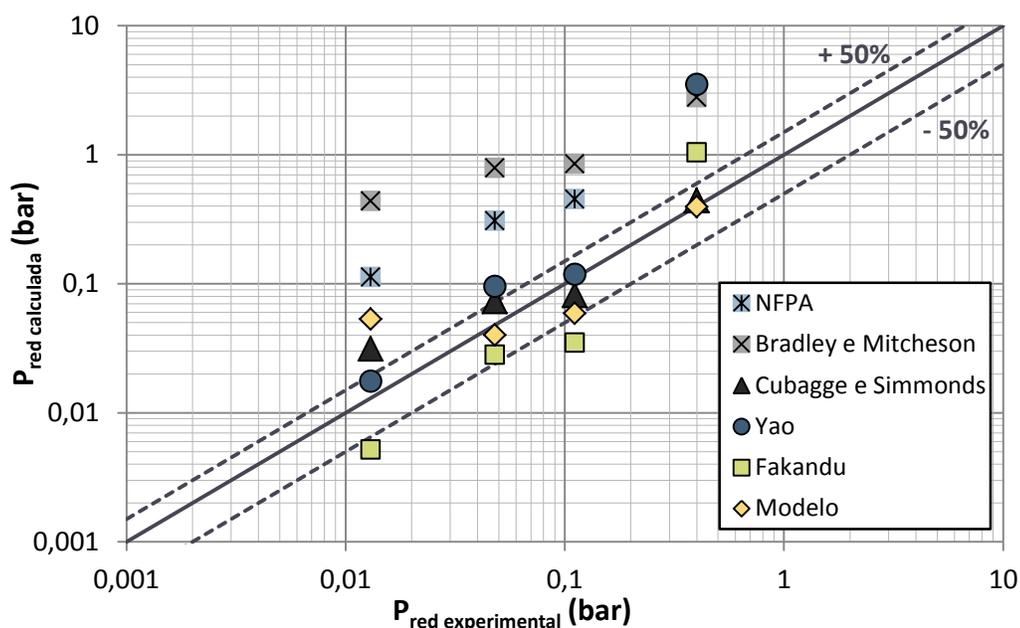


Figura 6.48: Gráfico log-log de comparação entre os resultados obtidos com os modelos e os dados dos experimentos da *British Gas*, *Shell* e *DNV* em termos de máxima sobrepressão da explosão (P_{red}) para a câmara vazia. As retas tracejadas representam desvio igual a + 50% e - 50% e a reta contínua representa desvio igual a zero.

De acordo com os resultados dispostos no gráfico da Figura 6.48, os modelos NFPA (1998) e Bradley e Mitcheson (1978) *apud* Razus e Krause (2001), apresentaram desvios extremamente altos para os quatro casos analisados, todos maiores que + 310 %, e, portanto, esses foram os modelos com os piores desempenhos gerais. Os desvios dos modelos de Yao (1974) e Fakandu *et al.* (2011) também foram altos para o experimento da *British Gas*. Entretanto, apesar do desempenho não satisfatório da correlação de ϵ , o modelo desenvolvido foi o que apresentou um dos melhores desempenhos gerais, estimando as sobrepressões com desvios dentro da faixa 0 a - 50% para os experimentos da *British Gas* e *Shell*, porém, com relação ao experimento da *DNV*, o modelo apresentou um desvio relativamente alto, mas como o valor de sobrepressão experimental para esse caso é muito pequeno (0,013 bar) essa diferença pode ser considerada pequena do ponto de vista de engenharia.

Ainda com relação aos resultados da Figura 6.48, o modelo de Cubagge e Simmonds (1955) *apud* Razus e Krause (2001) também apresentou um ótimo desempenho geral, com desvios dentro da faixa + 140 a - 30%, o que foi um tanto quanto inesperado, já que esse modelo

foi desenvolvido com base em dados experimentais de pequena e média escala, e a escala é um fator que influencia bastante a sobrepressão da explosão, segundo Bjerketvedt *et al.* (1997). Mas mesmo apresentando um bom desempenho nos quatro experimentos, o modelo de Cubbage e Simmonds (1955) ainda possui a limitação de não ser sensível à presença de tubos dentro da câmara, que é um dos grandes diferenciais do modelo desenvolvido.

O desempenho do modelo desenvolvido também foi comparado com o de dois modelos muito utilizados na área de Análise de Consequências, Equivalência de TNT e TNO multi-energia. A Figura 6.49 apresenta os resultados de sobrepressão obtidos com o TNT e a Figura 6.50 com o TNO multi-energia, para os casos de câmara sem obstruções dos experimentos da *British Gas*, da *Shell* e da *DNV*.

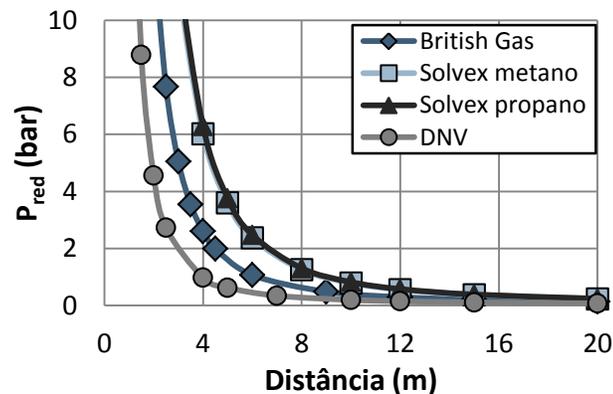


Figura 6.49: Gráfico da máxima sobrepressão da explosão (P_{red}) em função da distância para o modelo TNT aplicado aos experimentos: *British Gas*, *SOLVEX* metano, *SOLVEX* propano e *DNV*.

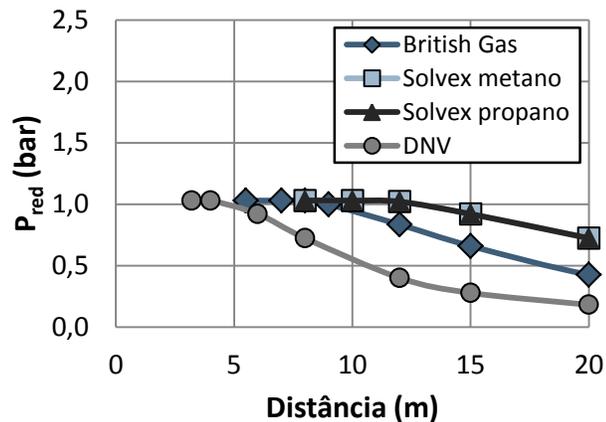


Figura 6.50: Gráfico da máxima sobrepressão da explosão (P_{red}) em função da distância para o modelo TNO multi-energia aplicado aos experimentos: *British Gas*, *SOLVEX* metano, *SOLVEX* propano e *DNV*.

Primeiramente é importante ressaltar que esses modelos foram desenvolvidos para estimar a sobrepressão em função da distância e normalmente são utilizados para prever a sobrepressão em pontos mais afastados da fonte de ignição. O TNT, por exemplo, superestima a sobrepressão próximo à nuvem, já que se baseia em dados de explosões de TNT, que se comportam de uma maneira bem diferente das explosões de gás, já que numa explosão de TNT a sobrepressão é máxima próximo ao ponto de ignição e vai caindo ao longo da distância, e nas explosões de gás, a sobrepressão vai aumentando a partir do ponto de ignição e só começa a decair numa dada distância após a passagem da chama pela nuvem inflamável (MANNAN, 2012). Já o TNO multi-energia nem fornece valores de sobrepressão em distâncias muito próximas ao ponto de ignição, já que os dados de sobrepressão das dez curvas das simulações numéricas que são utilizadas para a obtenção dos resultados começam num valor de distância escalada igual a 0,3 (CCPS, 2000). E isso pode ser visualizado nos gráficos das Figuras 6.49 e 6.50, já que quanto mais se aproxima do ponto de ignição (distância igual a zero), o TNT tende a valores altíssimos de sobrepressão, e o TNO só começa a ser avaliado a partir de certo valor da distância.

Portanto, não seria muito prudente comparar os resultados em termos de máxima sobrepressão da explosão dentro da câmara do modelo desenvolvido com os desses modelos, já que o resultado do TNT tenderia a um valor de sobrepressão extremamente alto próximo ao ponto de ignição, e o do TNO seria o valor correspondente ao primeiro ponto da curva, que é o mesmo para todos os casos analisados, já que foi considerado que eles apresentam a mesma força da

explosão (7). Tendo isso em vista, o modelo desenvolvido pode ser considerado o mais adequado para a estimativa da máxima sobrepressão dentro da câmara quando comparado aos modelos TNT e TNO. Entretanto esses modelos são extremamente úteis na estimativa da sobrepressão máxima da explosão em pontos mais afastados da ignição, e na verdade, eles poderiam ser utilizados em conjunto com o modelo desenvolvido com esta finalidade.

7 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

7.1 CONCLUSÕES

Um modelo para a estimativa da máxima sobrepressão de uma explosão de gás baseado no conceito *flamelet* foi desenvolvido. Ele foi elaborado de modo a representar o efeito da presença de obstruções na sobrepressão de uma explosão que ocorre em uma câmara em larga escala com *vent* que se assemelha a um módulo *offshore*, onde as obstruções do processo são representadas por tubos cilíndricos. O modelo em questão foi implementado no *software* de planilhas eletrônicas *Microsoft Excel* e apresenta tempo de resposta curto.

Na fase inicial de desenvolvimento do modelo, concluiu-se que a funcionalidade da função empírica $f(u'_{rms}/u_L)$, utilizada na modelagem da escala de comprimento integral do enrugamento (\hat{L}_y), foi comprometida devido às considerações que tiveram que ser feitas para adaptar a modelagem BML da taxa de reação química de modo que ela pudesse ser empregada em um modelo mais simples. Com isso, outra modelagem para a escala de comprimento integral do enrugamento (\hat{L}_y) foi proposta, logo a formulação inicial do modelo sofreu alterações, e, por conseguinte, o efeito da presença de obstáculos na sobrepressão, que no modelo inicialmente proposto era representado pela velocidade turbulenta *rms* (u'_{rms}), passou a ser representado pela taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ε).

De acordo com os resultados do modelo proposto para o experimento da *British Gas* foi possível depreender que a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε) não pode ser considerada apenas uma função da razão de bloqueio de volume (*VBR*), e que a razão de bloqueio de área (*ABR*) é um dos parâmetros que deveria ser incluído numa futura correlação, visto que exerce bastante influência em ε .

Ainda com base nos resultados para o experimento da *British Gas*, também foi possível concluir que as hipóteses utilizadas no desenvolvimento do modelo (de que a escala de comprimento integral do enrugamento pode ser considerada igual à escala de comprimento de Kolmogorov, e que a chama se propaga no modo planar) foram bastante razoáveis, uma vez que o modelo conseguiu estimar as sobrepressões adequadamente para os casos com obstruções desse experimento quando os valores de ε do *FLACS* foram utilizados diretamente no modelo. Portanto

o modelo desenvolvido é capaz de representar o aumento da área da chama devido à turbulência causada pela presença de obstáculos numa câmara similar à do experimento da *British Gas*, mas para que o mesmo apresente um bom desempenho em outras geometrias seria fundamental que uma correlação mais adequada para ε fosse desenvolvida, visto que o modelo perderia o seu propósito se fosse necessário realizar simulações de *CFD* para cada caso que se deseja analisar com o intuito de se obter valores de ε .

Num primeiro momento, o modelo não foi capaz de representar satisfatoriamente os experimentos *SOLVEX* e o da *DNV*, visto que ambos apresentam valores bem altos de *ABR* e o seu efeito não foi incluído na correlação de ε . Ficou claro que o desenvolvimento de uma correlação para ε em função de *VBR* e *ABR* é crucial para um melhor desempenho do modelo em outras geometrias. Porém mesmo com o desenvolvimento dessa correlação um bom desempenho do modelo não está garantido, visto que ainda é preciso verificar se a razão $A_V/V^{2/3}$ exerce influência significativa em ε .

Entretanto é importante destacar que, independente do desenvolvimento de uma nova correlação para ε , alterando os valores de $|\hat{\sigma}_y|$ e δ dentro de uma faixa permitida (de 0,108 a 0,295 e de 1,7 a 4,65 mm, respectivamente), o modelo proposto tornou-se capaz de representar adequadamente os experimentos da *Shell* e da *DNV*. Esses parâmetros são tidos como as principais incertezas do modelo, e chegaram a exercer bastante influência nos resultados obtidos diante de alterações em seus valores, entretanto esta influência pode estar sendo intensificada pelo desempenho não ideal da correlação de ε .

E, apesar da correlação de ε não estar representando o seu comportamento adequadamente, o modelo proposto foi o que obteve um dos melhores desempenhos gerais, quando comparado com os de outros modelos, na estimativa da sobrepressão máxima das câmaras vazias dos experimentos da *British Gas*, *Shell* e *DNV*.

7.2 TRABALHOS FUTUROS

Com o intuito de aprimorar a correlação de ε , o efeito de *ABR* deve ser incluído na correlação. Para isso seria necessário realizar mais simulações no *FLACS*, e, utilizando a metodologia de superfície de resposta e o planejamento experimental, a correlação em questão

poderia ser obtida. Se não for possível obter dados de novas simulações, uma alternativa seria utilizar os dados de ε já disponíveis em um programa que disponibilize mais tipos de regressão que o *Excel*. Com isso, uma nova correlação, que se ajustaria melhor aos dados de ε , poderia ser obtida.

Também seria necessário verificar se a razão $A_V/V^{2/3}$ exerce influência significativa em ε , realizando simulações no *FLACS* para os mesmos arranjos de tubos, porém para um valor da razão $A_V/V^{2/3}$ maior. Se a influência desse parâmetro for expressiva, seria necessário incluir o seu efeito na correlação de ε . Para isso seria necessário realizar mais simulações no *FLACS* variando a área do *vent* para os mesmos arranjos de tubos, e com isso, desenvolver mais de uma correlação para ε , cada uma válida para uma faixa de valor da razão $A_V/V^{2/3}$.

Seria importante também fazer um estudo mais profundo com relação à determinação das incertezas do modelo (fator de orientação e espessura da chama). E, após o desenvolvimento da nova correlação de ε , também seria relevante investigar o efeito da variação desses parâmetros, uma vez que o desempenho não adequado da correlação pode estar potencializando a influência dessas incertezas nos resultados.

E ainda, como etapa futura, seria interessante realizar uma simulação de *CFD* utilizando a modelagem *BML* para a taxa de reação química para validar a hipótese feita, de que a escala de comprimento integral de enrugamento pode ser considerada da mesma ordem de grandeza que a escala de comprimento de Kolmogorov no momento em que a sobrepressão dentro da câmara é máxima.

Também seria relevante obter dados de ε das simulações no *FLACS* para casos com valores mais altos de *VBR*, já que a correlação desenvolvida só utilizou dados de ε para *VBR* indo de 0 até 3,5% e, apesar dos experimentos em larga escala utilizados nesse trabalho apresentarem valores de *VBR* nessa faixa, módulos *offshore* reais apresentam um grau de obstrução muito maior. De acordo com Hjertager *et al.* (1988), um módulo compressor apresenta *VBR* em torno de 13% e um módulo de separação em torno de 30%.

Finalmente, seria interessante acoplar o modelo desenvolvido ao modelo *TNO* multi-energia, já que esse último é extremamente útil na estimativa da sobrepressão máxima da explosão em pontos mais afastados da ignição, onde o modelo desenvolvido não é aplicável.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABDEL-GAYED, R.G.; AL-KHISHALI, K.J.; BRADLEY, D. Turbulent burning velocities and flame straining in explosions. **Proceedings of the Royal Society of London A**, v. 391, p. 393-414, 1984.

ABU-ORF, G.M. **Laminar flamelet reaction rate modelling for spark-ignition engines**. Ph.D. thesis - University of Manchester Institute of Science and Technology, Manchester, 1996 *apud* VIANNA, 2009 e *apud* VIANNA e CANT, 2010.

ABU-ORF, G.M.; CANT, R.S. A turbulent reaction rate model for premixed turbulent combustion in spark-ignition engines. **Combustion and Flame**, v. 122, p. 233-252, 2000.

ANDREWS, G.E.; BRADLEY, D. Determination of burning velocities: A critical review. **Combustion and Flame**, v. 18, p. 133-153, 1972a.

ANDREWS, G.E.; BRADLEY, D. The burning velocity of methane-air mixtures. **Combustion and Flame**, v. 19, p. 275-288, 1972b.

ARNTZEN, B.J. **Modelling of Turbulence and Combustion for Simulation of Gas Explosions in Complex Geometries**. Thesis - The Norwegian University of Science and Technology, Norway, 1998.

BENSON, S.W. **The foundations of chemical kinetics**. New York: McGraw-Hill, 1960, p. 431-438.

BJERKETVEDT, D.; BAKKE, J.R.; VAN WINGERDEN, K. Gas explosion handbook. **Journal of Hazardous Materials**, v. 52, p. 1-150, 1997.

BRADLEY, D.; MITCHESON, A. The venting of gaseous explosions in spherical vessels, II - Theory and experiment. **Combustion and Flame**, v. 32, p. 237-255, 1978 *apud* RAZUS e KRAUSE, 2001.

BRAY, K.N.C. Studies of the turbulent burning velocity. **Proceedings of the Royal Society of London A**, v. 431, p. 315-335, 1990.

BRAY, K.N.C.; CANT, R.S. Some applications of Kolmogorov's turbulence research in the field of combustion. **Proceedings of the Royal Society of London A**, v. 434, p. 217-240, 1991.

BRAY, K.N.C.; CHAMPION, M.; LIBBY, P.A. **Turbulent reactive flows**, v. 40 of Lecture Notes in Engineering, Springer-Verlag, Berlin, Germany, 1989 *apud* ABU-ORF e CANT, 2000.

CANT, R.S.; BRAY, K.N.C. Strained laminar flamelet calculations of premixed turbulent combustion in a closed vessel. **Twenty-Second Symposium on Combustion - The Combustion Institute**, p. 791-799, 1988.

CANT, R.S.; MASTORAKOS, E. **An introduction to turbulent reacting flows**. London: Imperial College Press, 2008, p. 1-36; 87-131.

CATES, A.; SAMUELS, B. A simple assessment methodology for vented explosions. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 4, p. 287-296, 1991.

CCPS (Center for Chemical Process Safety) - AIChE (American Institute of Chemical Engineers). **Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis**. Second edition. New York: AIChE, 2000, p. 57-243.

CCPS (Center for Chemical Process Safety). **Glossary**. Disponível em: <<https://www.aiche.org/ccps/glossary>>. Acesso em: 20 de janeiro de 2014.

CLANCEY, V.J. Diagnostic features of explosion damage. **Sixth International Meeting on Forensic Sciences**. Edinburgh, 1972 *apud* CCPS, 2000.

CROWL, D.A. *et al.* Process Safety. In: GREEN, D.W.; PERRY, R.H. (Ed.). **Perry's chemical engineers' handbook**. Eighth edition. New York: McGraw-Hill, 2008, p. 1-110.

CROWL, D.A.; LOUVAR, J.F. **Chemical process safety: Fundamentals with applications**. Second edition. Upper Saddle River: Prentice Hall PTR, 2009, p. 1-30, 225-282.

CSB (U.S Chemical Safety and Hazard Investigation Board). **Safety bulletin: Dangers of purging gas pipe into buildings**. *S.l.: s.n.*, 2010. 5 p.

CUBBAGE, P.A.; SIMMONDS, W.A. An investigation of explosion reliefs for industrial drying ovens. **Trans. Inst. Gas Eng.**, v. 105, p. 470-475, 1955 *apud* RAZUS e KRAUSE, 2001.

DADASHZADEH, M.; ABBASSI, R.; KHAN, F.; HAWBOLDT, K. Explosion modeling and analysis of BP Deepwater Horizon accident. **Safety Science**, v. 57, p. 150-160, 2013.

DNV GL (Det Norske Veritas Germanischer Lloyd). **Phast**. Disponível em: <http://www.dnv.com/services/software/products/phast_safeti/phast/index.asp>. Acesso em: 01 de março de 2014.

EXAME. **Negócios**. Disponível em: <<http://exame.abril.com.br/negocios/noticias/os-60-anos-da-petrobras-contados-em-60-imagens?p=44>>. Acesso em: 20 de maio de 2014.

FAKANDU, B.M.; SATTAR, H.; PHYLAKTOU, H.N.; ANDREWS, G.E. Vented gas explosion in small vessels of L/D of 2.4. **23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS)** Irvine: University of California, 2011.

FERREIRA, T.D. **Developing a mathematical model for prediction of flammable gas cloud size based on CFD and response surface methodology**. Dissertation - Faculty of Chemical Engineering, University of Campinas, Campinas, 2014.

FOLHA ONLINE. **Cotidiano Online**. Disponível em: <<http://www1.folha.uol.com.br/folha/cotidiano/plataforma.shtml>>. Acesso em: 20 de maio de 2014.

FOX, R.W.; PRITCHARD, P.J.; McDONALD, A.L. **Introduction to fluid mechanics**. Seventh edition. Hoboken: John Wiley & Sons, 2009, p. 19-43, 161-208.

GARRISON, W.G. Major fires and explosions analysed for 30-year period. **Hydrocarbon Processing**, 1988 *apud* BJERKETVEDT *et al.*, 1997.

HJERTAGER, B.H.; FUHRE, K.; BJORKHAUG, M. Gas explosion experiments in 1:33 and 1:5 scale offshore separator and compressor modules using stoichiometric homogeneous fuel/air clouds. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 1, p. 197-205, 1988.

HUSER, A.; FOYN, T.; SKOTTENE, M. A CFD based approach to the correlation of maximum explosion overpressure to process plant parameters. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 22, p. 324-331, 2009.

ICHEME (Institution of Chemical Engineers). **Safety & Loss Prevention Special Interest Group**. Disponível em: <<http://www.icheme.org/slp>>. Acesso em: 27 de setembro de 2013.

JAROSINSKI, J. The thickness of laminar flames. **Combustion and Flame**, v. 56, p. 337-342, 1984.

JOHNSON, D.M. The potential for vapour cloud explosions – Lessons from the Buncefield accident. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 23, p.921-927, 2010.

LEA, C.J.; LEDIN, H.S. **A Review of the State-of-the-art in gas explosion modelling**. Buxton: Health & Safety Laboratory - HSL, 2002. 82 p.

MACHADO, J.C.V.; **Reologia e escoamento de fluidos - Ênfase na indústria do petróleo**. 1ª Edição. Rio de Janeiro: Editora Interciência, 2002, p. 13 - 19.

MANNAN, S. (Ed.). **Lees' loss prevention in the process industries: Hazard identification assessment and control - Volume 2**. Fourth edition. Oxford: Butterworth-Heinemann of Elsevier, 2012. Chapter 17: Explosion, p. 1367- 1678.

MCALLISTER, S.; CHEN, J.; FERNANDEZ-PELLO, A.C. **Fundamentals of combustion processes**. First edition. New York: Springer, 2011, p. 89-98.

NFPA (National Fire Protection Association). **NFPA 68 Guide for venting of deflagrations**. Quincy: NFPA, 1998 *apud* RAZUS e KRAUSE, 2001.

OFFICE. **Adicionar uma tendência ou linha média a um gráfico**. Disponível em: <<http://office.microsoft.com/pt-br/excel-help/adicionar-uma-tendencia-ou-linha-media-a-um-grafico-HA102809798.aspx>> Acesso em: 18 de agosto de 2014a.

OFFICE. **Equações para calcular linhas de tendência**. Disponível em: <<http://office.microsoft.com/pt-br/help/equacoes-para-calcular-linhas-de-tendencia-HP005207807.aspx?CTT=1>> Acesso em: 18 de agosto de 2014b.

PARK, D.J.; LEE, Y.S.; GREEN, A.R. Prediction for vented explosions in chambers with multiple obstacles. **Journal of Hazardous Materials**, v. 155, p. 183-192, 2008a.

PARK, D.J.; LEE, Y.S.; GREEN, A.R. Experiments on the effects of multiple obstacles in vented explosion chambers. **Journal of Hazardous Materials**, v. 153, p. 340-350, 2008b.

PEDERSEN, H.H.; TOMLIN, G.; MIDDHA, P.; PHYLAKTOU, H.N.; ANDREWS, G.E. Modelling large-scale vented gas explosions in a twin-compartment enclosure. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 26, p. 1604-1615, 2013.

PITBLADO, R.; ALDERMAN, J.; THOMAS, J.K. Facilitating consistent siting hazard distance predictions using the TNO Multi-energy Model. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 30, p. 287-295, 2014.

POINSOT, T.; VEYNANTE, D. **Theoretical and numerical combustion**. Second edition. Philadelphia: Edwards, 2005. Chapter 4: Introduction to turbulent combustion, p. 125-214.

POPE, S.B. **Turbulent flows**. Cambridge: Cambridge University Press, 2000, p.182-190, 358-386.

PUTTOCK, J.S.; YARDLEY, M.R.; CRESSWELL, T.M. Prediction of vapour cloud explosions using the SCOPE model. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 13, p. 419-431, 2000.

RAZUS, D.M.; KRAUSE, U. Comparison of empirical and semi-empirical calculation methods for venting of gas explosions. **Fire Safety Journal**, v. 36, p.1-23, 2001.

SHARMA, R.K; GURJAR, B.R.; WATE, S.R.; GHUGE, S.P.; AGRAWAL, R. Assessment of an accidental vapour cloud explosion: Lessons from the Indian Oil Corporation Ltd. Accident at Jaipur, India. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 26, p. 82-90, 2013.

SUSTEK, J.; JANOVSKY, B. Comparison of empirical and semi-empirical equations for vented gas explosion with experimental data. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 26, p. 1549-1557, 2013.

TENNEKES, H.; LUMLEY, J.L. **A first course in turbulence**. London: MIT, 1989, p.1-26, 59-103.

TOWLER, G.; SINNOTT, R. **Chemical engineering design - Principles, practice and economics of plant and process design**. Second edition. Oxford: Butterworth-Heinemann of Elsevier, 2013. Chapter 10: Safety and Loss Prevention, p. 431-495.

URNS, S.R. **An introduction to combustion: Concepts and applications**. Second edition. Boston: McGraw- Hill, 2000, p. 1-68.

VERSTEEG, H.K.; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics - The finite volume method**. Second edition. England: Pearson – Prentice Hall, 2007, p. 1-113, 343-416.

VEYNANTE, D.; VERVISCH, L. Turbulent combustion modeling. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 28, p. 193-266, 2002.

VIANNA, S.S.V. **Numerical simulation of accidental explosions in offshore production plant**. Ph.D. thesis - St Edmund's College, University of Cambridge, Cambridge, 2009.

VIANNA, S.S.V.; CANT, R.S. Modified porosity approach and laminar flamelet modelling for advanced simulation of accidental explosions. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 23, p. 3-14, 2010.

YAN, B. *et al.* Experimental and modeling study of laminar burning velocity of biomass derived gases/air mixtures. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 36, p. 3769-3777, 2011.

YAO, C. Explosion venting of low-strength equipment and structures. **Loss Prevention in the Processes Industries**, v.8, p. 1-9, 1974 *apud* RAZUS e KRAUSE, 2001.

APÊNDICE

A. PROCEDIMENTO PARA UTILIZAÇÃO DA PLANILHA DESENVOLVIDA

A primeira aba da planilha, apresentada na Figura A.1, contém o Menu. Através dele o usuário pode escolher a aba da planilha que deseja visualizar. Para isso basta clicar em um dos ícones (botões em azul) disponíveis que um *hiperlink* direcionará o usuário para a aba escolhida. Todas as outras abas da planilha possuem um ícone intitulado “Voltar para o Menu” localizado sempre na parte superior da aba, e clicando nele um *hiperlink* direcionará o usuário de volta para essa primeira aba.

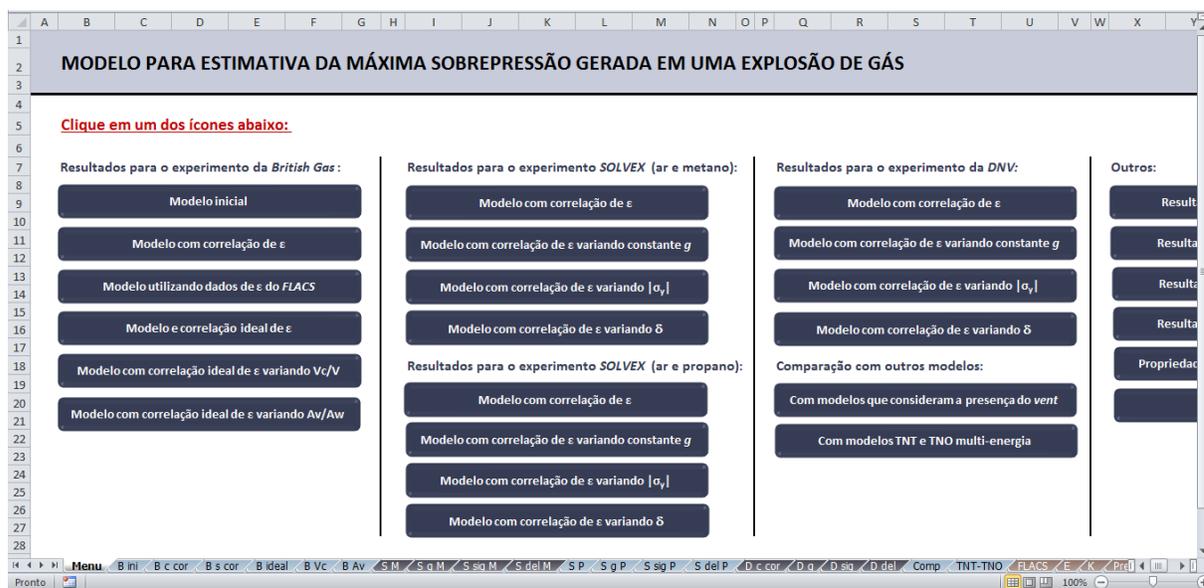


Figura A.1: Layout do Menu da planilha desenvolvida.

No Menu os ícones foram separados em seis categorias: Resultados para o experimento da *British Gas*, Resultados para o experimento *SOLVEX* (ar e metano), Resultados para o experimento *SOLVEX* (ar e propano), Resultados para o experimento da *DNV*, Comparação com outros modelos e Outros. As quatro primeiras categorias possuem ícones que levam a abas da planilha que contém o modelo proposto implementado. Já a categoria “Comparação com outros modelos”, possui dois ícones que direcionam o usuário para abas que contém outros modelos

implementados. E finalmente a categoria “Outros” contém ícones que encaminham o usuário para abas secundárias, que possuem dados que foram utilizados nas abas principais.

Com o intuito de ilustrar como a planilha deve ser utilizada para se obter resultados com o modelo proposto, apenas uma aba foi escolhida. Clicando no ícone “Modelo com correlação de ε ” da categoria “Resultados para o experimento da *British Gas*”, o usuário é direcionado para a aba da planilha que contém os resultados obtidos com o modelo proposto utilizando a correlação de ε em função de *VBR* que foi desenvolvida com os dados do *FLACS*. A Figura A.2 exibe o *layout* da aba em questão.

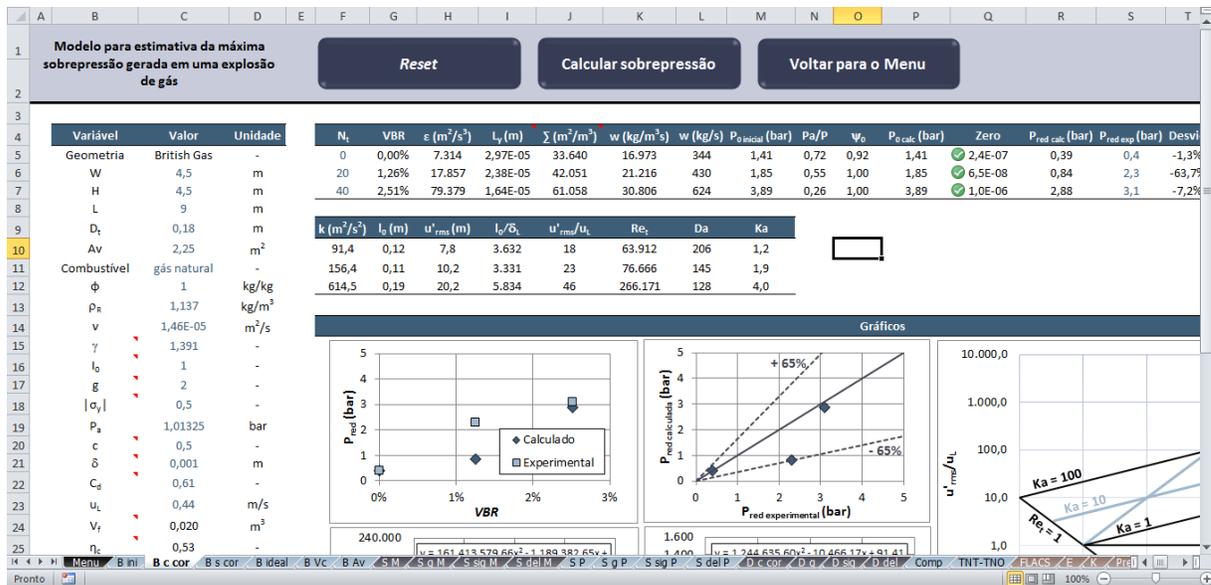


Figura A.2: *Layout* da aba “Modelo com correlação de ε ” da categoria “Resultados para o experimento da *British Gas*”.

Para a obtenção de resultados utilizando o modelo proposto, basicamente quatro passos precisam ser realizados:

1. Inserir os dados de entrada necessários;
2. Clicar no botão “Reset”, localizado na parte superior da aba da planilha, para que $P_{o\text{ inicial}}$ retorne ao valor inicial adotado (1,01326 bar);

3. Clicar no botão “Calcular sobrepressão”, também localizado na parte superior da planilha, para que o *Solver* realize as iterações necessárias até convergir, de linha em linha;
4. Verificar se o *Solver* convergiu, observando se os ícones da coluna “Zero” estão verdes (caso contrário eles estarão vermelhos).

Após a realização desses passos, os resultados são exibidos em três tipos de gráficos: o gráfico de sobrepressão máxima da explosão em função da razão de bloqueio de volume, o gráfico de sobrepressão máxima de explosão calculada versus sobrepressão máxima da explosão experimental e o diagrama de Borghi modificado.

Os passos 2, 3 e 4 são extremamente simples e rápidos, portanto só há necessidade de detalhar o primeiro passo, o de inserção de dados de entrada. Para isso uma visão geral da planilha será apresentada, de modo a facilitar o reconhecimento das variáveis de entrada e das calculadas.

No canto esquerdo da aba em questão (Figura A.2) é possível visualizar uma tabela que contém a maior parte das variáveis de entrada da planilha. Nesta tabela primeiramente devem ser inseridos os dados referentes à geometria do problema (Figura A.3), como a largura da câmara (W), a altura da câmara (H), o seu comprimento (L), o diâmetro dos tubos que estão dentro dela (D_t) e a área do *vent* (A_V).

	A	B	C	D	E
4		Variável	Valor	Unidade	
5		Geometria	British Gas	-	
6		W	4,5	m	
7		H	4,5	m	
8		L	9	m	
9		D_t	0,18	m	k (r
10		A_V	2,25	m ²	9

Figura A.3: Dados de entrada referentes à geometria do problema.

Depois, os dados da mistura ar e combustível (Figura A.4), tais como o tipo de combustível, a razão de equivalência (Φ), a densidade dos reagentes (ρ_R), a viscosidade

cinemática (ν) e a razão do calor específico (γ), precisam ser incluídos. Os valores de ρ_R , ν e γ na verdade são estimados em outra aba, que no Menu pode ser localizada através do ícone “Propriedades das misturas ar e combustível” da categoria “Outros”. A Figura A.5 mostra o *layout* da aba em questão, e as células O9, O10 e O11 contêm os valores calculados dessas variáveis para a mistura estequiométrica de ar e gás natural. Esta aba, além de conter dados para a mistura ar e gás natural estequiométrica, possui dados para as misturas ar e metano e ar e propano estequiométricas (Φ igual a 1) e também para a mistura ar e propano rica (Φ igual a 1,3).

	A	B	C	D	E
11		Combustível	gás natural	-	1
12		ϕ	1	kg/kg	6
13		ρ_R	1,137	kg/m ³	
14		ν	1,46E-05	m ² /s	
15		γ	1,391	-	

Figura A.4: Dados de entrada referentes à mistura ar e combustível.

The screenshot shows a complex Excel spreadsheet with multiple tables and sections. The main sections include:

- Propriedades substâncias:** Tables for Methane, Propane, Nitrogen, and Carbon Dioxide, listing variables like density (ρ), dynamic viscosity (μ), kinematic viscosity (ν), and specific heat ratio (γ).
- Propriedades gás natural esteq.:** Table for natural gas properties, including volume fractions and densities.
- Propriedades propano esteq.:** Table for stoichiometric propane properties.
- Propriedades propano $\Phi=1,3$:** Table for rich propane mixture properties.
- Propriedades metano esteq.:** Table for stoichiometric methane properties.
- Composição ar:** Table for air composition.
- Mistura ar + metano estequiométrica:** Table showing the composition of a stoichiometric air-methane mixture.
- Mistura ar + propano estequiométrica:** Table showing the composition of a stoichiometric air-propane mixture.
- Mistura ar + propano $\Phi=1,3$:** Table showing the composition of a rich air-propane mixture.

Figura A.5: *Layout* da aba “Propriedades das misturas ar e combustível” da categoria “Outros”.

Em seguida, as constantes da modelagem BML, como o fator de correção de estiramento médio (I_0), a constante g e o fator de orientação ($|\hat{\sigma}_y|$), precisam ser introduzidas (Figura A.6). Logo após, outras constantes do modelo devem ser inseridas (Figura A.7), como a pressão

atmosférica (P_a), a variável de progresso (c), a espessura da chama (δ) e o coeficiente de descarga (C_d).

	A	B	C	D	E
16		l_0	1	-	
17		g	2	-	
18		$ \alpha_y $	0,5	-	

Figura A.6: Dados de entrada referentes às constantes da modelagem BML.

	A	B	C	D	E
19		P_a	1,01325	bar	
20		c	0,5	-	
21		δ	0,001	m	
22		C_d	0,61	-	

Figura A.7: Dados de entrada referentes às constantes do modelo.

Ainda na mesma tabela, os parâmetros que são calculados e não dependem do grau de obstrução da câmara podem ser visualizados na Figura A.8. São eles: velocidade de queima laminar (u_L), volume da chama (V_f), o valor crítico que determina o tipo de escoamento (η_c), a espessura da chama laminar (δ_L), o volume da câmara (V), e os parâmetros adimensionais $A_V/V^{2/3}$, A_V/A_W e L/W . É importante destacar que a velocidade de queima laminar é calculada na aba “Propriedades das misturas ar e combustível” da categoria “Outros” (Figura A.5), que apresenta, além do valor calculado de u_L para a mistura ar e gás natural estequiométrica, os valores de u_L para as misturas ar e metano e ar e propano estequiométricas (Φ igual a 1) e também para a mistura ar e propano rica (Φ igual a 1,3).

	A	B	C	D	E
23		u_L	0,44	m/s	
24		V_f	0,020	m^3	
25		η_c	0,53	-	
26		δ_L	3,3E-05	m	
27		V	182,3	m^3	
28		$Av/V^{2/3}$	0,07	-	
29		Av/Aw	0,11	-	
30		L/W	2,00	-	

Figura A.8: Parâmetros calculados que não dependem do grau de obstrução da câmara.

Ainda na aba da Figura A.2, na parte superior estão localizadas mais duas tabelas, com vários parâmetros calculados que dependem do grau de obstrução da câmara, e dois parâmetros de entrada (Figura A.9). Os últimos dados de entrada a serem incluídos são o número de tubos total (N_t) e os valores de sobrepressão máxima da explosão experimentais ($P_{red\ exp}$). Entre os parâmetros calculados têm-se na sequência, a razão de bloqueio de volume (VBR), a máxima taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ϵ), a escala de comprimento integral do enrugamento (\hat{L}_y), a razão área superficial da chama por unidade de volume (Σ), a taxa de reação química (w), a razão P_a/P , o termo que depende do tipo de escoamento (ψ_0), a pressão máxima calculada ($P_{0\ calc}$), a sobrepressão máxima calculada ($P_{red\ calc}$), o desvio dos valores de sobrepressão calculados em relação aos dados experimentais (Desvio), a energia cinética turbulenta máxima (k), a escala de comprimento dos turbilhões maiores (l_0), a velocidade turbulenta rms (u'_{rms}), as razões l_0/δ_L e u'_{rms}/u_L , e os números adimensionais de Reynolds turbulento (Re_t), de Damköhler (Da) e Karlovitz (Ka).

É importante mencionar que k e ϵ estão sendo calculados por meio de correlações em função de VBR que foram obtidas através da regressão polinomial de dados do *FLACS*, e esses resultados estão contidos nas abas “Resultados do *FLACS* e correlação de ϵ ” e “Resultados do *FLACS* e correlação de k ” da categoria “Outros”.

	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T
4	N_t	VBR	ϵ (m ² /s ³)	L_v (m)	Σ (m ² /m ³)	w (kg/m ³ s)	w (kg/s)	$P_{0\text{ inicial}}$ (bar)	P_a/P	Ψ_0	$P_{0\text{ calc}}$ (bar)	Zero	$P_{\text{red calc}}$ (bar)	$P_{\text{red exp}}$ (bar)	Desvio
5	0	0,00%	7.314	2,97E-05	33.640	16.973	344	1,41	0,72	0,92	1,41	✔ 2,4E-07	0,39	0,4	-1,3%
6	20	1,26%	17.857	2,38E-05	42.051	21.216	430	1,85	0,55	1,00	1,85	✔ 6,5E-08	0,84	2,3	-63,7%
7	40	2,51%	79.379	1,64E-05	61.058	30.806	624	3,89	0,26	1,00	3,89	✔ 1,0E-06	2,88	3,1	-7,2%
8															
9	k (m ² /s ²)	l_0 (m)	u'_{rms} (m)	l_0/δ_t	u'_{rms}/u_t	Re_t	Da	Ka							
10	91,4	0,12	7,8	3.632	18	63.912	206	1,2							
11	156,4	0,11	10,2	3.331	23	76.666	145	1,9							
12	614,5	0,19	20,2	5.834	46	266.171	128	4,0							

Figura A.9: Parâmetros que dependem do grau de obstrução da câmara.