

## SIMULAÇÃO EM CFD DE VAZAMENTO DE GÁS EM LABORATÓRIO DE QUÍMICA DO IFPB campus CAMPINA GRANDE

Vanessa Silva Rocha <sup>1</sup>  
Francisco de Assis Correia Diniz Filho <sup>2</sup>  
Andrey Oliveira de Souza <sup>3</sup>

### RESUMO

Ao trabalhar-se com gases inflamáveis, há sempre a preocupação com possíveis vazamentos que geram atmosferas explosivas. Estudar o comportamento da dispersão gasosa a partir de um possível vazamento permite dimensionar esta região perigosa, e auxilia na tomada de decisão para disposição de equipamentos em um laboratório. A utilização de técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) para este fim é uma alternativa de baixo custo, segura e confiável para simulação numérica. Assim, se faz necessário desenvolver um modelo CFD considerando as condições particulares da estrutura física do laboratório em questão e as propriedades físico-químicas do gás em uso. O domínio de cálculo é de uma geometria que considera um ponto de vazamento na parede, com diâmetro de 2 centímetros e a 1 metro do chão. A malha do domínio de cálculo foi projetada para ser estruturada e bastante refinada na região do orifício, com crescimento gradual do volume dos elementos a partir do ponto de vazamento do gás, permitindo uma resolução precisa e confiável. Selecionou-se o gás metano para representar o vazamento. Considerou-se que antes do vazamento, o domínio estaria livre do gás inflamável e que o mesmo vazou a 20 atm a partir do orifício. A análise do gráfico da dispersão gasosa em termo de diluição com o ar atmosférico demonstrou que, mesmo a 3 metros do ponto de vazamento, a concentração de metano no ar ainda estava dentro dos limites de inflamabilidade, sendo considerada uma região perigosa.

**Palavras-chave:** CFD, Dispersão gasosa, Laboratório químico.

### INTRODUÇÃO

A norma brasileira ABNT NBR 15526 sugere que a rede de distribuição interna de gás em uma edificação deve considerar, entre outros fatores, a ocorrência de acúmulo de gás eventualmente vazado. Um acúmulo de gás inflamável em uma região faz dela uma atmosfera explosiva, de onde a existência de um equipamento elétrico nas proximidades, por exemplo, pode levar a uma faísca que provoque uma explosão. Este acúmulo, por sua vez, está diretamente relacionado às condições de ventilação e exaustão do ambiente. O CRQ-IV (2012) destaca que prever a ocorrência de acúmulo de gás em um eventual vazamento, bem como avaliar as condições de ventilação/exaustão do ambiente que venham a minimizar os consequentes riscos, é a parte mais complexa na montagem de um laboratório.

---

1 Estudante do Curso Técnico em Química do Instituto Federal - IFPB, [vanessarocha4213@gmail.com](mailto:vanessarocha4213@gmail.com);

2 Estudante do Curso Técnico em Edificações do Instituto Federal - IFPB, [franciscofilhocorreiatpb@gmail.com](mailto:franciscofilhocorreiatpb@gmail.com) ;

3 Professor orientador: Doutor, [andrey.souza@ifpb.edu.br](mailto:andrey.souza@ifpb.edu.br)

Trabalho como resultado de projeto de pesquisa.

A utilização de técnica de fluidodinâmica computacional (CFD) é uma alternativa de baixo custo, segura e confiável para simulação numérica de um eventual vazamento de gás e avaliação de riscos de acúmulo do mesmo, bem como avaliação da eficiência de ventilação para diluição e dispersão do gás vazado. Para tanto se faz necessário desenvolver um modelo CFD considerando as condições particulares da estrutura física dos laboratórios em questão e as propriedades físico-químicas do gás em uso.

Instalações com bancadas e demais obstáculos, bem como a troca contínua de ar ineficiente em um laboratório, pode acarretar altas concentrações de substâncias perigosas no transcorrer da jornada de trabalho, incorrendo em risco para as pessoas e danos materiais de equipamentos. A simulação numérica em CFD permite prever com fidelidade o comportamento de gases inflamáveis e/ou tóxicos em um eventual vazamento, através da análise do perfil de concentração ao longo de todo o domínio de interesse.

Desta maneira, avaliar a eficiência na diluição e dispersão de material perigoso no ambiente e para fora deste, através de simulação numérica, utilizando técnicas de fluidodinâmica computacional, se presta a ser uma via para experimentação e julgamento de engenharia confiável para ajustes e melhorias em projeto, sem envolver custos adicionais para as experimentações, nem riscos de segurança (SOUZA, 2016).

## **METODOLOGIA**

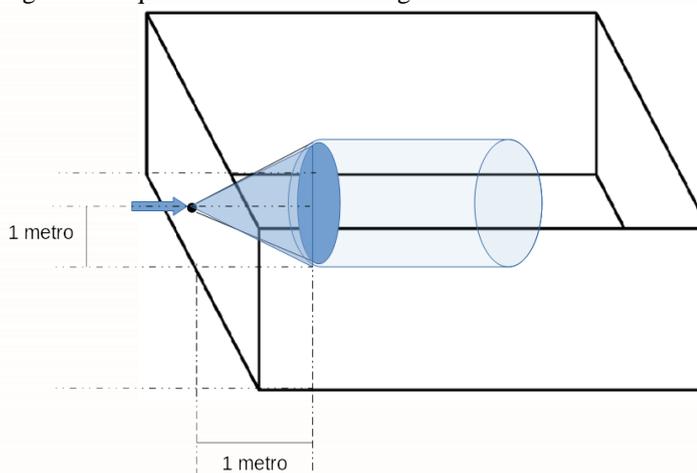
O trabalho foi desenvolvido utilizando o *software* ANSYS™ CFX® 18.1, para modelagem e simulação numérica de um eventual vazamento de gás em um laboratório de química do IFPB – campus Campina Grande, através de técnicas de CFD.

O detalhamento das equações de conservação, utilizada pelo CFX 18.1 na resolução do modelo via CFD, bem como o uso de equações constitutivas e modelos de turbulência para fechamento do sistema são encontrados bem documentados na literatura especializada (ANSYS CFX-Solver Theory Guide, 2006). Conforme recomenda Papanikolaou (2012), no estudo de vazamento de gases sob pressão supercrítica, neste trabalho foi adotado o modelo de turbulência SST (*Shear Stress Transport*), disponível no *software* ANSYS CFX 18.1.

De forma esquemática, de acordo com a figura 1, demonstra-se que o domínio de cálculo foi considerado a partir de uma entrada de gás na parede, a um metro do piso do laboratório. Considerou-se um cone a partir do ponto de vazamento, como uma região em que estaria

contido a dispersão gasosa mais significativa. O orifício foi considerado com 2 centímetros de diâmetro e a base com 2 metros de diâmetro, tendo o cone a altura de 1 metro.

Figura 1: Esquema de vazamento do gás no interior do laboratório.

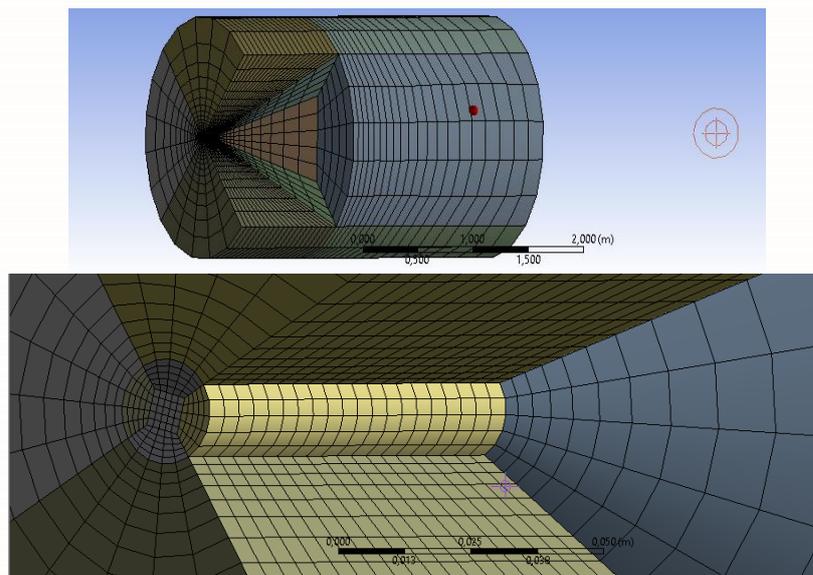


A geometria criada para simulação da dispersão gasosa foi um recorte do volume do cone e suas vizinhanças. Considerou-se que a geometria do laboratório completo só aumentaria o esforço computacional, sem impactar na qualidade dos resultados. Com o perfil de concentração ao longo do cone, foi possível verificar essa hipótese.

Em sequência, construiu-se a malha do domínio de cálculo, utilizando a ferramenta *Mesh* do pacote ANSYS® para discretização do domínio, onde foi aplicado o método numérico dos volumes finitos. O grau de refinamento deve ser verificado para que seja reduzido o tempo de simulação sem perda de precisão do resultado (SOUZA, 2016).

A malha foi estruturada, conforme a figura 2, onde a região de entrada do gás, na forma de uma circunferência onde a região da entrada do gás, na forma de uma circunferência de 2 cm de diâmetro, contou com 25 elementos. O tamanho desses elementos foi expandido para que a base do cone, descrito na metodologia, tivesse os mesmos 25 elementos, porém em um diâmetro de 2 metros, onde a partir daí os elementos não variava mais de tamanho. Desta maneira, garantiu-se um maior refinamento na entrada do gás no domínio de cálculo e uma expansão no tamanho do elemento, que tornou o esforço computacional requerido aceitável para a capacidade de uma máquina comercial.

Figura 2: Estrutura da malha.



No *setup* do modelo fluidodinâmico, definiu-se o metano como gás inflamável. A pressão de vazamento do gás foi admitida de 20 atm. As condições de contorno do domínio de cálculo foram ajustadas como *opening*, considerando que a região simulada não confina gás. A condição inicial é de que antes do vazamento não existia nenhuma concentração prévia de metano no ambiente. A tolerância para o método numérico foi de um residual de  $10^{-4}$ .

Como instrumento de coleta e análise dos dados, foram plotados as frações molares do gás calculadas em um plano longitudinal em relação à direção do vazamento. Coletando esses resultados em uma linha no eixo na direção desse vazamento, foi possível marcar estes valores em um gráfico de linha para melhor avaliar o decaimento da concentração do gás ao longo desse eixo.

## DESENVOLVIMENTO

Segundo Webber et al. (2011), classificação de área não é apenas um fator técnico, mas um requerimento legal. Dessa forma as normas que regulamentam as diretrizes para classificações de área devem garantir segurança e ter caráter legal, pois, sem isto, incertezas quanto a segurança podem surgir e os custos determinados para aquisição com equipamentos especiais, para utilização na classificação de área, podem ser dispendiosos ou insuficientes.

A classificação de áreas de atmosfera explosiva é e sempre foi um grande desafio para as pessoas que trabalham na área industrial, seja ela química, mecânica, entre outras, que necessitam garantir segurança quanto àquilo que pode ou não gerar uma área classificada. A norma internacional de classificação de áreas de atmosferas explosivas (IEC 60079-10) não é suficientemente clara quanto

aos critérios para classificação, podendo gerar valores sub ou superestimados, quando comparados a resultados validados em fluidodinâmica computacional (CFD). A pesquisa de trabalhos nesta área vem a corroborar com esse sentimento e a orientar novos trabalhos que venham a contribuir com essa demanda.

Ivings et al. (2008) comparou uma nuvem de emissão gasosa, em CFD, com a mesma situação calculada pela norma. Em sua simulação, colocou intervalos de pressão de saída fluido em um orifício de entrada de 0,25 a 0,5 mm<sup>2</sup>. O autor, portanto, concluiu que os resultados apresentados pela norma são superestimados e propôs um relaxamento ao seguir os guias de classificação de áreas, bem como buscar novas alternativas.

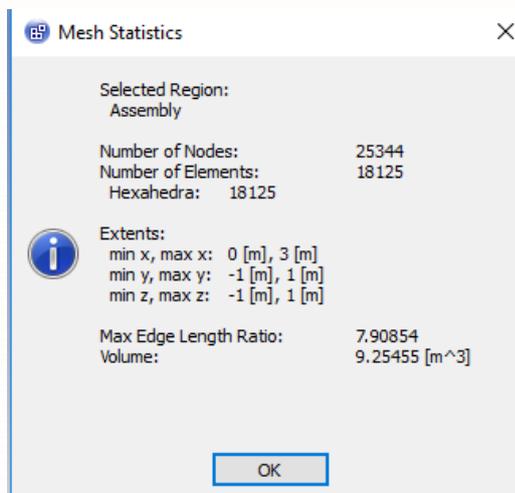
A partir desse e de outros trabalhos, Webber et al. (2011) propõe uma aproximação dos resultados obtidos nas simulações a partir de um modelo integral simples. A aproximação é utilizada com praticidade obtendo resultados que são testados experimentalmente e também validados via CFD. Desta forma, o uso desse método tornou-se muito mais frequente e utilizado em diversas pesquisas e campos de estudo. Como por exemplo, Miranda et al. (2013) utilizou dois métodos para a classificação de áreas: a norma europeia e as simulações utilizando CFD. Quando comparou os dois resultados, observou-se que os valores da norma são superestimados.

Pode-se afirmar que o avanço de resultados e experimentações gerados a partir de simulações via CFD tornam esse meio confiável para pesquisas e outros fins acadêmicos e científicos. Vale salientar que há também uma necessidade de buscar novas alternativas para reduzir o grande esforço computacional gerado a partir destas simulações (WIDIATMOJO, et al., 2016), o que faz com que haja a preocupação com modelos computacionais mais simples e menos pesados que simulem o problema com precisão e confiabilidade.

## **RESULTADOS E DISCUSSÃO**

Um resultado considerado adequado para os propósitos da simulação numérica, foi a estratégia de discretização de todo o domínio, de forma a buscar maior estabilidade ao processo de resolução das equações de conservação neste tipo de problema. Como pode-se perceber, na figura 3, a malha contou 18.125 elementos, sendo todos hexaédricos, de onde se conclui que se trata de uma malha 100% estruturada.

Figura 3: Estatísticas de malha



Para analisar o comportamento da dispersão do gás inflamável no domínio de cálculo, produziu-se um gráfico do perfil de concentração gasosa em termos de fração molar de gás metano ao longo do eixo a partir do ponto de vazamento, conforme as figuras 4 e 5.

Os resultados de dispersão gasosa em torno da linha central demonstram um rápido decaimento de concentração de gás metano a partir do ponto de vazamento. No entanto, mesmo a uma distância de 3 metros da fonte, ainda é possível encontrar o gás inflamável em fração dentro da faixa de seu limite de inflamabilidade, o que indica que o laboratório inteiro é considerado uma área classificada como região perigosa por se tratar de uma atmosfera explosiva em potencial. Assim, um projeto de ventilação para diluição do gás e renovação do ar se faz necessário, para que a instalação de equipamentos elétricos não represente um risco de segurança aos usuários do laboratório.

Figura 4: Resultado da simulação do vazamento expresso em fração molar.

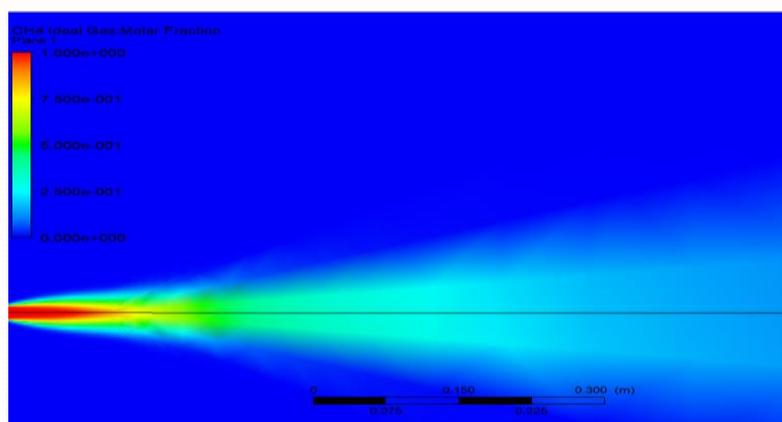
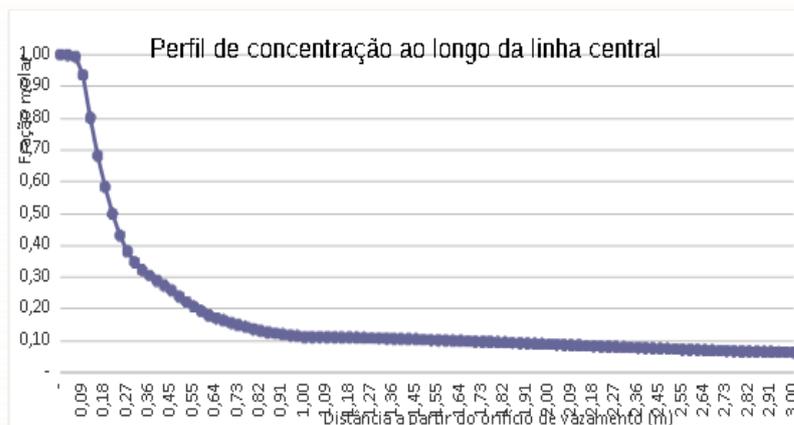


Figura 5: Perfil de concentração ao longo da linha central.



## CONSIDERAÇÕES FINAIS

Ao fim deste trabalho, pode-se concluir que os objetivos foram alcançados, uma vez que a partir de técnicas de fluidodinâmica computacional foi possível prever o comportamento da dispersão gasosa, permitindo também, a partir de um vazamento de gás inflamável, avaliar a extensão da área classificada como atmosfera explosiva, e, assim, sugerir medidas preventivas. Os resultados demonstraram que, para as condições de vazamento simulada, a extensão da área classificada abrange todo o laboratório. Como sugestão para trabalhos futuros, pode-se simular uma condição de ventilação forçada que favoreça a dispersão do gás para níveis não perigosos.

## REFERÊNCIAS

ABNT NBR IEC 60079. **Atmosferas Explosivas Parte 10-1: Atmosferas explosivas de gás:** 2009.

ABNT NBR 15526. **Redes de distribuição interna para gases combustíveis em instalações residenciais e comerciais – Projeto e execução:** 2007.

ANSYS CFX- Solver Theory Guide, **ANSYS Release 11.0**, ANSYS, Inc. Southpointe, Canonsburg, 2006.

CRQ – IV Região – Comissão de Ensino Técnico. **Guia de laboratório para ensino de Química: instalação, montagem e operação.** São Paulo, 2012.

IVINGS, MJ., GANTS, S. E., **CFD Modelling of Low Pressure Jets for Area Classification,** Health & Safety Laboratory report HSL/2005/11, Buxton, UK, 2008.

MIRANDA, J. T., CAMACHO, E. M., FORMORSO, J. A. F., GARCÍA, J. D. R., **Comparative study of methodologies based on Standard UNE 60079/10/1 and computational fluid dynamics (CFD) to determine zonal reach of gas generate Atex explosive atmospheres,** Journal of Loss Prevention in the Process Industries, Elsevier, Vol. 26, 839-850, 2013.

PAPANIKOLAOU, E., BARALDI, D., KUZNETSOV, M., VENETSANOS, A., **Evaluation of notional nozzle approaches for CFD simulations of free-shear under-expanded hydrogens jets.** Hydrogen Energy. Elsevier, 37: 18563-18574, 2012.

SOUZA, A. O., **Estudo e Inovação em Classificação de Áreas de Atmosfera Explosiva via Fluidodinâmica Computacional.** Tese de Doutorado. Universidade Federal de Campina Grande, 2016.

WEBBWE, D. M., IVINGS, M.J., and SANTON, R.C., **Ventilation theory and dispersion modelling applied to hazardous area classification,** Journal of Loss Prevention in the Process Industries, Volume 24, 2011, Pg 612–621, 2011.

WIDIATMOJO, A., et al., **Predicting gas dispersion in large scale underground ventilation: A particle tracking approach.** Building and Environment, ELSEVIER, 95, 171 – 181, 2016.