

SIMULAÇÃO DE CFD EM UM SISTEMA DE DISTRIBUIÇÃO DE ÁGUA CONTAMINADO POR MATERIAL QUÍMICO TÓXICO

CFD simulation in a system for the distribution of water contaminated by toxic chemical material

C. E. S. BONFIM (1); P. A. M. CABRAL (2); T. BRUM (3); F. B. OUGANO (4);

- (1) Engenheiro Químico, Instituto de Defesa Química, Biológica, Radiológica e Nuclear, Rio de Janeiro - RJ, Brasil.
 - (2) Engenheiro Químico, Instituto de Defesa Química, Biológica, Radiológica e Nuclear, Rio de Janeiro - RJ, Brasil.
 - (3) Engenheiro Mecânico, Instituto de Defesa Química, Biológica, Radiológica e Nuclear, Rio de Janeiro - RJ, Brasil.
 - (4) Engenheiro Químico, Instituto de Defesa Química, Biológica, Radiológica e Nuclear, Rio de Janeiro - RJ, Brasil.
 - (5) Dr. Prof., Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro - RJ, Brasil.
 - (6) Dr. Prof., Universidade Federal do Espírito Santo, Alegre - ES, Brasil
- Email para Correspondência: bonfim.carlos @eb.mil.br; (P) Apresentador

Abstract: Summary: In this decade, the Brazilian Defense sector was in evidence due to the Great Events, Military World Games, Rio + 20, Confederations Cup, World Youth Day, World Cup and Olympics held in the country. Security, potentially susceptible events, terrorist acts and of great negative impact on society. This work proposes to analyze the effect of a terrorist attack in a similiar system to a water supply reservoir with capacity of 12 m³, under atmospheric pressure of 1 atm, at a temperature of 25 °C and that was contaminated with SOMAM.

In terms of operating conditions, a reservoir outlet orifice, in the range of 0.002 m <radius <0.06 m, was considered. The contaminants adopted for the simulation were: Dimethyl polysiloxane (PDSM), (C₂H₆OSi)_n, density of 977 kg/m³ at 25°C and SOMAN, C₇H₁₆FO₂P, molar mass 182,175 g/mol, density of 1,0222 g/ml at 25°C, water solubility of 2.1 x 10⁴ mg/l at 20 ° C. Data from EVANS (2013) and BENNET (1984), respectively, were used.

The scenario was simulated in the ANSYS CFX, academic version 18.2, through a mesh containing 187,500 elements of the hexagonal type (hex 8), analyzing the stationary and transient states, through the k-e model, after the mesh convergence and using an Lagrangian and Eulerian modeling approach for the dispersed phase.

Finally, for the validation of the computational model, the experiment of ADAMS AND MASUTANI (2001) was chosen.



During the analysis of the results it was observed that in the steady state, the multiphase plume predominantly occurs according to the density difference and consequently, the tendency of the contaminant is to seek the top and bottom of the reservoir.

For the conditions where we have the transient flow and through the hole in the bottom of the container, the multiphase plume has its reduced effects due to the variation in the size of the hole diameter.

In addition, this variation in diameter implies that seeking total system emptying to clean the pipes could last for 5.56 min of up to 76 hours

For the stationary scenario and the assumptions adopted, the simulations studied identified that the main areas of risk impacted primarily are the top or the bottom, depending on the density of the contaminant inserted.

Finally the comparison with the benchmark carried out through the experiment of ADAMS and MASUTANI (2001) was chosen.

Keywords: CFD; war agent; soman; Euler; Lagrangian

INTRODUÇÃO

A disponibilidade de água limpa, potável e segura é vital para a existência de todos os organismos vivos, dos ecossistemas, comunidades e economias. Entretanto, a qualidade da água no planeta vem sendo degradada, à medida que as populações humanas crescem, as atividades agrícolas e industriais se expandem e as mudanças climáticas alteraram o ciclo hidrológico global (BEYRUTH, 2008). Consequências adversas também podem surgir de ações inesperadas, como a contaminação oriunda de acidentes químicos, ou dolosa, como a praticada por terroristas, demonstrando possível vulnerabilidade de medidas governamentais e sociais concernentes à mitigação desses acidentes.

Tal importância nos faz atentar que é necessário implementarmos ações e adotarmos procedimentos que visem à garantia desse bem fundamental e vital que é a água.

Por isso, quando se fala de soberania nacional e de segurança, não somente as Forças Armadas, mas também todos os setores relacionados direta ou indiretamente à questão da Segurança, devem estar atentos e preparados para evitar e, no pior dos casos, para resolver o problema da contaminação oriunda de materiais químicos tóxicos de forma eficiente e eficaz, tentando reduzir a zero o número de vítimas.

Os atos terroristas, que pretendem criar um ambiente de terror psicológico, intimidar e coagir (ALY & GREEN, 2010) o público alvo com objetivos políticos, sociais e religiosos, dentre outros, podem se valer de Agentes de Guerra ou de Materiais Industriais Tóxicos para atingir seus objetivos. Esses materiais podem ser obtidos com alguma facilidade no mercado industrial. Nesse caso, um problema de segurança relevante é ter



capacidade de conter a dispersão do agente tóxico com a máxima eficiência possível, quando o agente tóxico atinge um ambiente público.

. Nesse sentido, o Estado Brasileiro constituiu um ordenamento jurídico especificamente para o crime de terrorismo, através da Comissão Mista de Consolidação das Leis e Regulamentação da Constituição apresentou no Congresso Nacional o Projeto de Lei do Senado (PLS) 499/2013, batizada como Lei Antiterrorismo. Baseada na Constituição Federal e Leis nº 7.170, de 14 de dezembro de 1983; Lei nº 8.072, de 25 de julho de 1990; e, Lei nº 9.474, de 22 de julho de 1997.

Os métodos computacionais em fluidodinâmica, *Computational Fluid Dynamics – CFD*, se mostram indispensáveis no cenário atual, pois podem simular cenários muito vezes próximos a situações reais e com baixo custo, gerando dados e informações úteis para tomada de decisão em eventos trágicos previamente determinados.

Em particular, BARBOSA (2011) empregou as simulações em CFD para a construção de cenários que envolviam ações terroristas nos eventos de repercussão mundial sediados pelo Brasil, como em 2014 na Copa do Mundo, e propôs que o mesmo fosse realizado para as olimpíadas em 2016 nas Olimpíadas.

Nesse contexto, este trabalho tem por objetivo, analisar os efeitos causados pela inserção de um material químico tóxico dentro de um sistema de distribuição de água, em termos de efeitos de densidade, difusividade e níveis de concentração de letalidade. Dessa forma, pretende-se propor uma metodologia ou procedimento para identificação imediata e ameaças, com pronta ação de resposta

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Computational Fluid Dynamics – CFD (Fluidodinâmica Computacional), é uma metodologia computacional para simulação numérica de escoamentos de fluido e energia. As ferramentas de CFD usam as leis que governam os fluxos de massa e energia⁸ para simular com detalhes um determinado cenário ou processo, de natureza física ou química.

Para conduzir uma simulação de CFD é necessário executar normalmente os seguintes passos: (i) compreender o fenômeno físico e químico existente; (ii) determinar as hipóteses simplificadoras; (iii) gerar o modelo matemático a partir das equações fundamentais das áreas de termodinâmica e de fluidodinâmica; (iv) executar a modelagem do processo, incluindo a representação geométrica do sistema; (v) gerar uma malha de simulação; e, por fim, (vi) executar a simulação.

As principais equações envolvidas nos problemas de CFD são as equações fundamentais (BIRD, 2004) de balanços de massa, quantidade de movimento e energia. Para o caso de escoamento unifásico e de um único componente, as equações fundamentais ganham a forma das Equações 1-3:

1- Balanço de massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -[\nabla \cdot \rho \vec{v}] \quad (1)$$

2- Balanço de quantidade de movimento:

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right] = \mu \nabla^2 \vec{v} + \rho G - \nabla p \quad (2)$$

3- Balanço de energia:

$$\rho C_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) T \right] = (\nabla \cdot k \nabla T) + Q \quad (3)$$

Para obter soluções numéricas adequadas para as equações de balanço, é necessário aplicar uma técnica numérica apropriada. O Método dos Volumes Finitos é aquele usado mais frequentemente para resolver problemas de CFD. Para obter a solução numérica das Equações (1-3), um determinado volume do meio contínuo deve ser inicialmente definido e posteriormente discretizado. Então, em cada elemento discretizado impõe-se que a propriedade em estudo satisfaça as leis de conservação da Equação 4. Desta forma, considerando o transporte de uma grandeza escalar ϕ em um fluxo transiente, obtém-se:

$$\left[\frac{\partial \rho \phi_j}{\partial t} \right]^I + \left[\frac{\partial \rho u_i \phi_j}{\partial x_i} \right]^II = \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi_j}{\partial x_i} \right) \right]^III + [S_j^\phi]^IV \quad (4)$$

em que:

- I representa o termo de acumulação ou a taxa de variação da grandeza ϕ , ao longo do tempo, que é mantido quando a análise se der de forma transiente e é anulada na análise estacionária;
- II representa o termo de transporte advectivo;
- III representa o termo de transporte difusivo;
- IV representa o termo fonte;
- ρ é a massa específica;
- t é o tempo;
- x_i representa genericamente a direção cartesiana;
- u_i , representa a componente do vetor velocidade ao longo da direção i ;
- ϕ_j é a grandeza a ser conservada;
- Γ^ϕ é a difusividade da grandeza conservada no meio;



- S^ϕ é o termo de geração, também chamado termo-fonte (corresponde à soma de todos os termos das equações de conservação que não sejam de acúmulo ou de transporte).

Existem alguns programas que disponibilizam ambientes apropriados para a condução de simulações de CFD. Neste trabalho foi escolhido o software ANSYS CFX, da Empresa ANSYS Inc., comercializado exclusivamente no Brasil pela empresa ENGINEERING SIMULATION AND SCIENTIFIC SOFTWARE LTDA (ESSS).

3. METODOLOGIA

O cenário de simulação se propõe a analisar o efeito de um ataque terrorista em um sistema similar a um reservatório predial de distribuição de água com capacidade de 12 m³, sob pressão atmosférica de 1 atm, na temperatura de 25 °C e que foi contaminado com o agente de guerra química SOMAM.

Em termos de condições operacionais, foi considerado um orifício de saída do reservatório, no intervalo de 0,002 m < raio < 0,06 m. Os contaminantes adotados para a simulação foram: Dimetil polissiloxano (PDMS), (C₂H₆OSi)_n, densidade de 977 kg/m³ à 25° C e o SOMAN, C₇H₁₆FO₂P, massa molar 182.175 g/mol, densidade de 1.0222 g/ml à 25° C, solubilidade em água de 2,1x10⁴ mg/l à 25° C. Foram utilizados dados obtidos em EVANS(2013) e BENNET (1984) respectivamente.

O cenário foi simulado no ANSYS FLUENT, versão acadêmica 18.2, através de uma malha contendo 187.500 elementos do tipo hexagonal (hex 8), analisando os estados estacionários e transientes, por meio do modelo k-ε, após realizada a convergência da malha e usando uma abordagem de modelagem euleriana e lagrangiana para a fase dispersa.

Por fim e para validação do modelo computacional, foi escolhido o experimento de ADAMS E MASUTANI (2001).

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Durante a análise dos resultados foi observado que no estado estacionário, a pluma multifásica predominantemente ocorre de acordo com a diferença de densidades e consequentemente, a tendência do contaminante é buscar o topo e o fundo do reservatório.

Como ilustrado nas figuras 1 e 2 abaixo:

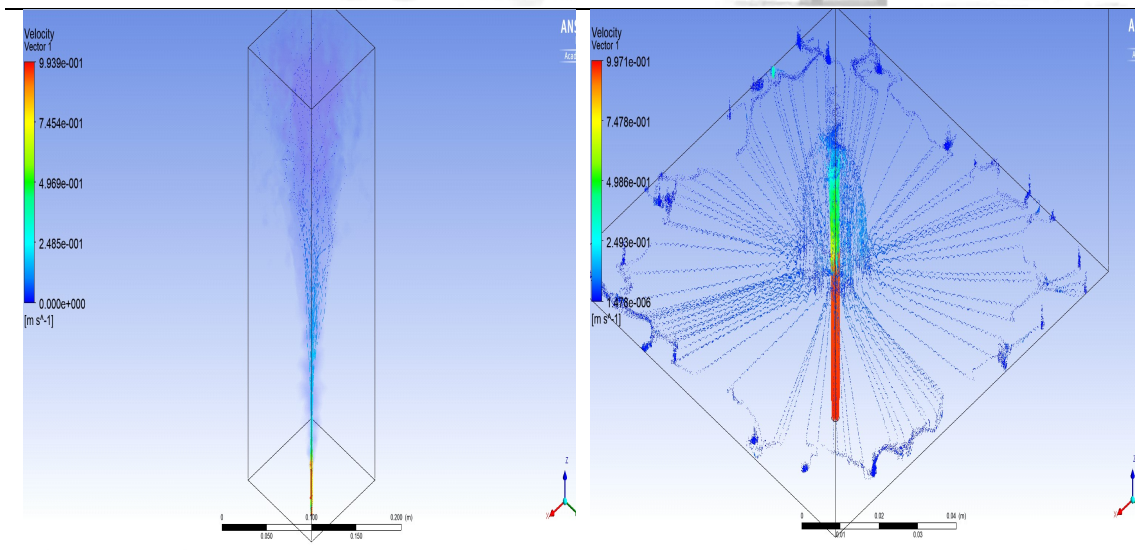


Figura 1: (PDSM) indo em direção ao topo

Figura 2: SOMAN indo em direção ao fundo.

Para as condições onde temos o escoamento transiente e através do orifício no fundo do recipiente, a pluma multifásica tem seus efeitos reduzidos, devido à variação no tamanho do diâmetro do orifício.

Além disso, essa variação no diâmetro, implica que buscar o esvaziamento total do sistema, equação (1) de forma a limpar as tubulações, poderia durar 5,56 min, para grandes diâmetros e de até 76 horas para o menor.

$$\int_{h_0}^{h_1} \frac{Ad}{a\sqrt{2gh}} = \int_{t_0}^{t_1} dt \quad (5)$$

em que:

- h representa a altura do líquido;
- A representa a seção transversal do reservatório;
- a representa seção transversal do orifício;
- t tempo de descarga; e
- g representa a gravidade.

Para o cenário estacionário e as premissas adotadas, as simulações estudadas identificaram que as principais áreas de risco impactadas prioritariamente são o topo ou o fundo, a depender da densidade do contaminante inserido. Consequentemente uma proposta de monitoramento está ilustrada na Figura 3.

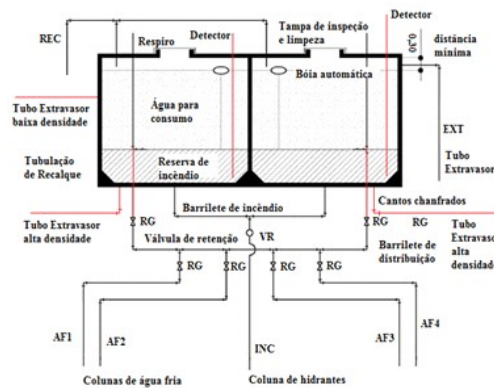


Figura 3: Proposta de monitoramento de contaminação.

O trabalho estudou com auxílio de simulações de CFD um sistema de distribuição de água. Mostrou-se em particular a forte relação existente entre o mecanismo de dispersão do agente químico e a sua densidade. Mostrou-se também o forte controle dos termos convectivos sobre o processo, já que os tempos característicos de difusão são lentos. Se o material é pouco (muito) denso, após jogado em meio aquoso o material se concentra rapidamente na superfície (fundo) do meio líquido, por conta dos movimentos convectivos, misturando-se lentamente por difusão, à medida que o tempo passa. Por isso, a contaminação do sistema de distribuição só ocorre se o consumo de água impuser o transporte convectivo do contaminante pelos tubos de distribuição.

Para as premissas adotadas, as simulações estudadas identificaram que as principais áreas de risco são o topo ou o fundo, a depender da densidade do contaminante inserido, e que o aparecimento do sinal de mudança de composição é rápido. Dessa forma foi possível propor soluções para monitorar o sistema submetido a essas condições, conforme ilustrado na Figura 3.

Por fim, o modelo a abordagem lagrangeana configurou-se melhor à proposta da simulação, para altas vazões com a inclusão de uma força extra de dispersão turbulenta.

REFERÊNCIAS

Beyruth, Z., 2008. Água, agricultura e as alterações climáticas globais. *Revista Tecnologia & Inovação Agropecuária* 1,74. [[Link](#)]

Aly, Anne; Green, Lelia., 2010, Fear, anxiety and the state of terror. *Studies in Conflict & Terrorism*, 2010, 33, 268, <http://dx.doi.org/10.1080/10576100903555796>.

Barbosa, I. V. M.; *Tese de Doutorado*, Instituto Militar de Engenharia, 2012.



Bennett SR et al; 1984, Environmental Hazards of Chemical Agent Simulants. CRDC-TR-84055, Aberdeen Proving Ground, MD.

BRASIL. Projeto de Lei do Senado n° 499 de 2013.

BRASIL. Lei n° 7170, de 14 de dezembro de 1983. Define os crimes contra a segurança nacional, a ordem política e social, estabelece seu processo e julgamento e dá outras providências. Diário Oficial da República Federativa do Brasil, Brasília, 15 dez. 1983.

BRASIL. Lei n° 8072, de 25 de julho de 1990. Dispõe sobre os crimes hediondos, nos termos do art. 5º, inciso XLIII, da Constituição Federal, e determina outras providências. Diário Oficial da República Federativa do Brasil, Brasília, 26 jul. 1990.

BRASIL. Lei n° 9474, de 25 de julho de 1990. Dispõe sobre os crimes hediondos, nos termos do art. 5º, inciso XLIII, da Constituição Federal, e determina outras providências. Diário Oficial da República Federativa do Brasil, Brasília, 26 jul. 1990.
Hirsch, Charles, *Numerical Computation of internal & external flow*. 2a ed., Oxford: Butterworth-Heinemann, 2007.

Evans TJ; Kirk, 2013, -Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. (1999-2013). New York, NY: John Wiley & Sons; Chemical Warfare. Online Posting Date: Mar 14, 2003

Vianna, A. S. J. et al, CFD e a defesa química. *Revista Virtual de Química*. **2014**, 3, 815.
Bird, R.B., Stewart, W.E, e Lightfoot, E.N, *Fenômenos de Transporte*, 2a ed., LTC, 2004.
AnsysInc, *ANSYS CFX Users Guide*, **2009**.