

## Artigo

## CFD e a Defesa Química

Vianna Jr., A. S.\*; Siqueira, F. C. S.; Radusweski, L.; Lima, A. L. S.

Rev. Virtual Quim., 2014, 6 (3), 815-832. Data de publicação na Web: 16 de março de 2014

<http://www.uff.br/rvq>

## CFD and Chemical Defense

**Abstract:** Computational Fluid Dynamics is a modeling and simulation tool which can be used to understand tridimensional flows, for instance, the distributions of concentrations of chemicals. This work provides the basics of Computational Fluid Dynamics in order to emphasize its importance. Two case studies are presented, one is the chlorine gas dispersion from a transient source and the other is from a continuum source, where its concentration iso-surfaces are analyzed.

**Keywords:** Computational Fluid Dynamics; gas dispersion; modeling; simulation.

## Resumo

A fluidodinâmica computacional é uma ferramenta de modelagem e simulação que pode ser utilizada para compreender fluxos tridimensionais, por exemplo, distribuições de concentrações de substâncias químicas. Este trabalho apresenta diversos conceitos relacionados com a fluidodinâmica computacional de forma a assinalar sua importância. São apresentados dois estudos de caso, a dispersão de gás cloro de uma fonte transiente e de uma fonte contínua, onde isosuperfícies de concentração são analisadas.

**Palavras-chave:** Fluidodinâmica computacional; dispersão de gás; modelagem; simulação.

\* Universidade de São Paulo, Escola Politécnica, Departamento de Engenharia Química, Av. Prof. Luciano Gualberto trav. 3, nº 380, CEP 05508-010, São Paulo-SP, Brasil.

✉ [ardson@usp.br](mailto:ardson@usp.br)

DOI: [10.5935/1984-6835.20140049](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20140049)

## CFD e a Defesa Química

Ardson S. Vianna Jr.,<sup>a,\*</sup> Fábio C. S. de Siqueira,<sup>a</sup> Leandro R. Quintal,<sup>b</sup>  
Antônio Luiz S. Lima<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Universidade de São Paulo, Escola Politécnica, Departamento de Engenharia Química, Av. Prof. Luciano Gualberto trav. 3, nº 380, CEP 05508-010, São Paulo-SP, Brasil.

<sup>b</sup> Instituto Militar de Engenharia, Seção de Engenharia Química, Divisão de Ensino e Pesquisa, Praça General Tibúrcio 80, CEP 22290-270, Rio de Janeiro-RJ, Brasil.

\* [ardson@usp.br](mailto:ardson@usp.br)

*Recebido em 15 de março de 2014. Aceito para publicação em 16 de março de 2014*

### 1. Introdução

### 2. Fundamentos

- 2.1. Modelagem e simulação
- 2.2. Equações fundamentais
- 2.3. Turbulência
- 2.4. Volumes finitos
- 2.5. Geração de malhas
- 2.6. Fluidodinâmica computacional (CFD)

### 3. Potenciais utilizações de CFD na área de defesa química

### 4. Exemplo: dispersão de gás cloro em estação de metrô

### 5. Conclusões

## 1. Introdução

O uso da Dinâmica dos Fluidos Computacional [do inglês: *Computational Fluid Dynamics* (CFD)] já é uma realidade presente nas chamadas áreas estratégicas de alta tecnologia, tais como, as nucleares, aeroespaciais e de defesa. CFD é considerada como uma tecnologia de interesse da Defesa Nacional, segundo a Concepção Estratégica publicada pelo Ministério da Defesa e pelo Ministério da Ciência e Tecnologia.<sup>1</sup> Em várias ocasiões os cálculos de CFD podem ser

usados ao invés de executarem-se experimentos perigosos, caros ou de alta complexidade, como análises de risco, propagação de ondas de choques causadas por detonação de alto explosivo ou efeitos balísticos do impacto de um projétil em blindagem.<sup>2</sup>

A CFD, também chamada de Fluidodinâmica Computacional, estuda os fenômenos relacionados com a movimentação de fluidos e suas propriedades. O ponto de partida são as equações básicas dos fenômenos de transporte, ou seja, a equação da

continuidade, os balanços de quantidade de movimento e de energia. Vários fenômenos são regidos por estas transferências, que incluem transferência de fluidos (bombas, ventiladores, compressores), retirada ou doação de calor (transferência de calor, processos de separação), transferência de massa, mudanças de fases, reações, movimentos mecânicos (agitadores) e deformações de sólidos (carga de vento em estruturas). Como exemplos específicos podem ser citados a avaliação do desenvolvimento de calor dentro de uma pilha térmica,<sup>3</sup> avaliação do campo de velocidades dentro de um tanque de mistura,<sup>4</sup> a fluidodinâmica de um reator tubular de polimerização em espiral,<sup>5</sup> e o campo de velocidades que se desenvolve dentro de um reator concêntrico que degrada materiais via processos oxidativos avançados.<sup>6</sup>

A ideia deste trabalho é assinalar o potencial que a ferramenta de CFD apresenta tomando como exemplo a área de defesa. Para isso, são apresentados dois exemplos de dispersão do gás cloro em uma estação de metrô.<sup>7</sup>

## 2. Fundamentos

As técnicas de CFD fazem parte de um processo mais amplo de modelagem e simulação, portanto o seu uso efetivo passa pela compreensão deste processo (item 2.1). Após o fenômeno físico ser compreendido, são consideradas hipóteses de forma a gerar o modelo matemático a partir das equações fundamentais da termofluidodinâmica, que estão apresentadas no item 2.2. Então, entra a ferramenta de CFD em si. Esta contém três elementos:<sup>8</sup> a modelagem da turbulência (item 2.3), a geração da malha (item 2.4) e o desenvolvimento de algoritmos (item 2.5).

### 2.1. Modelagem e simulação

O processo de modelagem e simulação se inicia com a consideração de um conjunto de hipóteses a respeito de como ocorrem os fenômenos físicos e químicos no interior dos equipamentos, que são, então, inseridas no conjunto de equações fundamentais (balanços de massa, quantidade de movimento e energia, equações constitutivas, etc.). O modelo é, então, resolvido matematicamente – simulação – gerando respostas que são comparadas com os dados experimentais, para sua validação.

A compreensão de um fenômeno é realizada através do progresso conceitual. A cada nova tentativa, com novas hipóteses, tem-se uma maior compreensão do que acontece, mais se sabe sobre o sistema e mais profundas poderão ser as modificações a serem feitas.

A revisão de ideias e o desenvolvimento do modelo não são necessariamente no sentido da maior complexidade ou do aumento do número de parâmetros, mas sim do resgate de explicações para os fenômenos e para a reprodução dos dados experimentais.

Observando a quantidade de modelos encontrados na literatura, a pergunta que naturalmente aparece é: o quê caracteriza um modelo como “bom”? A literatura diz que um bom modelo é aquele que reúne de forma ótima o conjunto complexidade matemática-explicação dos resultados experimentais.<sup>9</sup>

### 2.2. Equações fundamentais

Os problemas em fluidodinâmica têm como fundamentos os balanços de massa, quantidade de movimento e energia.<sup>10</sup> As particularidades de cada problema são introduzidas pelas condições de contorno e pelas equações constitutivas. As equações de balanço têm como origem o seguinte balanço:

$$\left( \begin{matrix} \text{taxa de} \\ \text{acumulação} \end{matrix} \right) - \left( \begin{matrix} \text{taxa de} \\ \text{convecção} \end{matrix} \right) + \left( \begin{matrix} \text{taxa de} \\ \text{difusão} \end{matrix} \right) = \left( \begin{matrix} \text{taxa de} \\ \text{produção} \end{matrix} \right) \quad \text{Eq. 1}$$

Aplicando-se o balanço acima para a massa do sistema, tem-se a equação da continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -[\nabla \cdot (\rho \vec{v})] \quad \text{Eq. 2}$$

Onde t é o tempo, ρ é a densidade do fluido, v<sub>i</sub> é o vetor velocidade e ∇ é o operador nabla.

Já para o fluxo de quantidade de movimento, tem-se:

$$\rho \left[ \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla \vec{v}) \right] = \mu \nabla^2 \vec{v} + \rho \mathbf{G} - \nabla p \quad \text{Eq. 3}$$

Onde é t o tempo, ρ é a densidade do fluido, v<sub>i</sub> é a vetor velocidade e ∇ é o operador nabla e μ é a viscosidade.

do movimento e para o momento (r<sub>i</sub> x v<sub>j</sub>) que é a 2ª equação do movimento, provando que o tensor tensão é simétrico. Mas, também pode ser utilizado para entalpia, entropia, energia cinética turbulenta e taxa de energia cinética turbulenta.

Ao considerar ρ e μ constantes e fluido newtoniano na Equação 3, chega-se à equação de Navier-Stokes.<sup>2</sup> O balanço pode ser aplicado para outras propriedades como a energia cinética (½ ρ v<sup>2</sup>), que é a 1ª equação

Para o balanço de energia, chega-se a:

$$\rho C_p \left[ \frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla T) \right] = (\nabla \cdot k \nabla T) + Q \quad \text{Eq. 4}$$

Onde C<sub>p</sub> é calor à pressão constante, T é a temperatura, k é a condutividade térmica e Q

é o termo fonte de calor.

O balanço de massa para uma espécie é:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla C_A) = (\nabla \cdot D \nabla C_A) - R_A \quad \text{Eq. 5}$$

Spalding<sup>11</sup> propõe que isso seja feito através de uma equação generalizada da

propriedade φ:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u \phi)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v \phi)}{\partial y} + \frac{\partial (\rho w \phi)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + S^{\phi} \quad \text{Eq. 6}$$

Onde  $\phi$  é a propriedade,  $t$  é o tempo,  $x$ ,  $y$  e  $z$  são as componentes do vetor posição,  $u$ ,  $v$  e  $w$  são as componentes do vetor velocidade,  $\Gamma$  é o coeficiente de transporte por difusão e  $S$  é o termo fonte.

Nas Equações 2-5 existem vários parâmetros a serem definidos como viscosidade ( $\mu$ ), calor específico ( $C_p$ ), condutividade térmica ( $k$ ) e coeficiente de difusão térmica ( $\Gamma = \alpha = k/\rho C_p$ ). Estes termos podem ser constantes, dependendo do material, mas podem seguir uma lei, como, por exemplo, a viscosidade que segue a lei das potências para fluido não newtoniano. As Equações de 2-5 são as constitutivas do sistema, onde é inserida a cinética química de um processo reativo ou como se comporta a densidade do material (equação de estado).

As condições de contorno mais simples na resolução de equações diferenciais são: de 1º tipo ou de Dirichlet, de 2º tipo ou de Neumann e de 3º tipo ou de Robin. Na condição de contorno de 1º tipo o valor da variável dependente é fixado, por exemplo:  $T=30^{\circ}\text{C}$ , para equação de energia ou  $v=0$  na parede, na equação do movimento. Na condição de 2º tipo o fluxo da variável é igual a zero. Para a condição de 3º tipo, ocorre fluxo em função do valor *bulk* da variável.

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi'$$

Eq.7

A média pode ser no tempo, no espaço ou no conjunto (*ensemble*).

Ainda procurando compreender a turbulência, Tennekes e Lumley<sup>13</sup> indicam diversas propriedades da turbulência:

i) Irregularidade: aleatoriedade, não há tratamento determinístico;

### 2.3. Turbulência

A turbulência é um movimento irregular que de uma forma geral surge em fluidos quando estes:<sup>8</sup>

- i) passam por superfícies sólidas; ou
- ii) quando fluxos de um mesmo fluido se movimentam ou sobrepõem uns sobre os outros.

Turbulência é um problema em aberto, não existe uma teoria ou explicação definitiva sobre isso. Otino<sup>12</sup> expõe isto muito bem quando discute os diversos encaminhamentos possíveis para modelar a turbulência. Um deles é o da estabilidade hidrodinâmica quando a turbulência é gerada a partir da organização, ou seja, do fluxo laminar. Outro é justamente o contrário: o de como que a desorganização se organiza. Ainda é possível usar escalas de tempo e tamanho – escalonamento, ou usar fractais ou até mesmo, a teoria do caos. Por isso, outra definição é apresentada: “movimento turbulento é uma condição irregular de fluxo em que várias quantidades mostram variações aleatórias com o tempo e com o espaço, de forma que valores médios que são estatisticamente distintos podem ser obtidos.”<sup>8,10</sup>

ii) Difusividade: a difusividade turbulenta é que causa mistura;

iii) Número de Reynolds alto;

iv) Rotacionalidade e 3D;

v) Dissipação: os fluxos turbulentos são sempre dissipativos;

vi) *Continuum*: está na escala do

contínuo, acima da escala molecular.

Uma apresentação didática para os modelos de turbulência pode considerar as correlações, os métodos integrais, as médias de Reynolds, a simulação de grandes escalas (LES – *large eddy simulation*) e a simulação numérica direta (DNS- *direct numerical simulation*).

As correlações são amplamente usadas em engenharia através dos fatores de atrito, que são números adimensionais gerados a partir de outros números como Reynolds, Nusselt e Prandtl.<sup>10</sup> São modelos semi-empíricos, portanto só podem ser aplicados na mesma faixa de sua obtenção.

Os métodos integrais reduzem em ao menos uma coordenada as equações de governo de mecânica dos fluidos. Utilizam dados experimentais no seu cômputo e precisam ser refeitos quando um novo tipo de escoamento é calculado.

A família de modelos mais popular é a gerada pelo processo de média para as equações de Navier-Stokes (RANS – *Reynolds Average Navier-Stokes*). O ponto de partida é decompor a propriedade em um valor médio e uma flutuação em torno da média, como na Equação 7.

A modelagem por grandes vórtices (LES) considera modelos para as pequenas escalas de turbulência, mas calcula os turbilhões para os grandes vórtices. Existe a necessidade de usar filtro, onde as escalas menores são filtradas e não calculadas. É uma situação intermediária entre o cálculo de médias e o cálculo efetivo de todas as escalas de turbilhões, o que é feito na simulação numérica direta (DNS). Infelizmente, o cálculo DNS ainda é limitado a casos com geometria simples e baixo número de Reynolds. Os cálculos LES requerem de 5 a 10% do tempo computacional do DNS.

A geração de modelos RANS foi resultado da contribuição de grandes expoentes da ciência: Reynolds (1886), Boussinesq (1877), Taylor (1915), Prandtl (1925), Von Karmam (1911) e Kolmogorov (1941). O primeiro

passo foi dado por Reynolds quando propôs que uma propriedade no regime turbulento poderia ser decomposta em um valor médio e uma flutuação, tal como na Equação 7. Estas componentes são então inseridas nas equações fundamentais e resultam em equações similares para as propriedades médias, mas surgem correlações de flutuações de duas propriedades. Este termo impõe o chamado problema de fechamento, porque há a necessidade de se propor uma solução para ele. Quando o termo é a correlação de velocidades em direções diferentes, este é chamado de tensor de Reynolds.

Uma proposta foi feita por Boussinesq, a aproximação de Boussinesq, onde o tensor de Reynolds toma a mesma forma da lei de Newton. Portanto, o tensor é proporcional ao gradiente da velocidade. Só que a constante de proporcionalidade é uma viscosidade turbulenta, que é uma propriedade do fluxo e não do fluido.

A teoria sobre turbulência ainda está em desenvolvimento. O modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ , bastante popular em engenharia química, não é bem adequado para todos os fenômenos físicos. Portanto, outras propostas foram feitas como o  $\kappa$ - $\epsilon$  renormalizado (RNG) e os modelos de fechamento de segunda ordem.<sup>8</sup>

## 2.4. Volumes finitos<sup>2</sup>

Volumes finitos é uma técnica de solução numérica para equações diferenciais adequada para equações com pelo menos uma coordenada espacial. A ideia central é manter o fluxo de propriedade entre volumes adjacentes. O método é composto por quatro etapas. Na primeira, divide-se o volume em um número finito de elementos de volume. Esta discretização chama-se geração de malha (*mesh*), que pode ser estruturada ou não estruturada. O próximo passo é reduzir o operador diferencial a um operador diferença. Embora seja similar a técnica de diferenças finitas, a ideia é usar a teorema

geral do cálculo onde se integra uma derivada. Com isso, não se insere erro algum, ao contrário da técnica de diferenças finitas, que aproxima o operador diferencial diretamente por um operador diferença.

Como exemplo, seja uma propriedade que se difunde segundo a Equação 6, mas sem advecção, em estado estacionário, em uma direção e sem fonte, ou seja difusão em uma direção:

$$0 = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)$$

Eq. 8

A ideia é integrar no intervalo finito de  $i$  a  $i+1$ :

$$\int_i^{i+1} \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx = 0$$

Eq. 9

A primeira integração não insere erro, já que é uma operação do cálculo:<sup>2</sup>

$$\int_i^{i+1} \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx = \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{em\ i+1} - \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{em\ i}$$

Eq. 10

A partir daqui, o operador diferencial é reduzido por diferenças finitas. Daí, gera-se um conjunto de equações algébricas, que ao ser resolvido (terceiro passo), resulta em um conjunto finito de pontos que é a solução por diferenças finitas. O último passo é representar este conjunto de dados, através de gráficos.

Esta é uma forma extremamente simplificada de apresentar o método, mas dá uma boa ideia central. A equação geral para a propriedade, Equação 6, já indica que existem outros termos a serem resolvidos. O termo advectivo já seria reduzido a uma fórmula diferença, contudo os valores da propriedade estariam representados na face e não nos centros dos volumes. Este é um problema inerente ao método, embora o foco seja calcular as propriedades nos centros dos volumes, as integrações geram valores nas faces dos elementos de volume. Isto gera as aproximações centradas, *upwind* e suas associações, como híbrido e *Power Law*.

O termo transiente pode ser resolvido pelos métodos tradicionais de Euler explícito, semi-implícito e implícito, com suas vantagens e desvantagens, como estabilidade e solução de sistemas tridiagonais (TDMA).

Finalmente, algo tem de ser falado sobre o termo fonte. Este é um forte potencial de fonte de não linearidade. Por isso, este termo sempre será linearizado ( $S^\phi = S_U + S_P \Phi_P$ ) de forma a se encontrar um sistema de equações lineares.

A resolução por volumes finitos envolve uma série de outros problemas que não foram discutidos, como condições de contorno, difusão numérica, acoplamento pressão-velocidade, número de Courant, mas os pontos essenciais foram abordados.

## 2.5. Geração de malhas

Um conceito básico em CFD é dividir o elemento de volume percorrido pelo fluxo

em várias subdivisões, chamadas de elementos ou células. O conjunto de células compõe a malha, com suas diversas linhas e pontos de interseção, ditos nós. A escolha da malha a ser implementada é um dos fatores decisivos na solução das equações diferenciais. Para problemas com geometria assimétrica e/ou com pontos críticos, é necessário inserir um número maior de pontos nestas regiões. A geração de malha pode ser feita em programas específicos para isto como o ICEM e o GAMBIT<sup>14</sup> da ANSYS ou opções *open sources* como o OpenMesh.<sup>15</sup>

As várias formas para as malhas fizeram com que se tornasse necessário classificar as malhas de acordo com: forma, ortogonalidade, estrutura, blocos, posição da variável e movimento das malhas.

As células podem ser triangulares ou quadriláteras. Caso todas as linhas formem 90°, diz-se que a malha é ortogonal, caso contrário ela é não ortogonal. Cabe ressaltar que as malhas não ortogonais terão de ser resolvidas em sistemas de coordenadas não ortogonais. Uma malha é dita estruturada se todos os pontos que formam uma célula são circundados pelo mesmo número de células em toda a malha.

## 2.6. CFD

De uma forma simples, a simulação via CFD pode ser vista como um conjunto composto por três pontos: 1) escolha de uma geometria que represente o fenômeno e o *mesh* associado, 2) solução matemática das equações diferenciais, equações constitutivas e condições de contorno associadas ao fenômeno e 3) apresentação visual dos resultados.<sup>16</sup> O resultado final é composto de gráficos de propriedades no espaço que podem levar a conclusões fortemente associadas com a geometria do problema.

Atualmente, a simulação via CFD é realizada em pacotes comerciais como o Phoenix<sup>®</sup>,<sup>11</sup>. Cada pacote possui seus pontos fortes e fracos, mas de uma forma

geral, as etapas a serem seguidas para avaliar uma situação física utilizando um pacote comercial de CFD são:<sup>16</sup>

- 1) Propor uma geometria que represente conceitualmente o sistema;
- 2) Representar a geometria;
- 3) Gerar ou importar o *mesh (grid)*;
- 4) Checar o *mesh*;
- 5) Selecionar um modelo preliminar no software;
- 6) Escolher as equações diferenciais básicas que representam o sistema: fluxo laminar ou turbulento (ou invíscido), espécies químicas, modelos de transferência de calor, etc. Identificar outros contextos físicos particulares: ventiladores, trocadores de calor, meios porosos, etc.
- 7) Especificar as propriedades do material: massa específica, viscosidade, condutividade térmica, etc.;
- 8) Escolher a formulação matemática mais apropriada: problema com rigidez ou com forte não linearidade.
- 9) Inserir as condições iniciais do problema: velocidade inicial em problema transiente;
- 10) Calcular a solução;
- 11) Examinar os resultados;
- 12) Salvar os resultados;

Se necessário, refinar o *mesh* ou considerar revisões do modelo físico ou numérico.

## 3. Potenciais utilizações de CFD na área de defesa química

O Ministério da Defesa junto com o MCT apresentaram uma proposta de desenvolvimento técnico-científico para fomentar trabalhos na área de Defesa.<sup>1</sup> Uma das áreas de interesse é o controle de possíveis ataques terroristas, chamada de



Defesa Química, Biológica e Nuclear (DQBN). A resposta para um ataque químico ou biológico tem como fundamentação teórica a contenção de acidentes com produtos químicos. A grande diferença é ter de identificar o agente contaminante, que é conhecido em um acidente, mas é desconhecido em um ataque terrorista.

O guia sequencial de ações a serem seguidas após um ataque terrorista foi desenvolvido por Fitch.<sup>17</sup> O plano identifica quatro fases: notificação, pronta resposta, caracterização e descontaminação e remediação. Durante a fase inicial de notificação, um centro de operações identifica um evento com base em sensores, informação de inteligência ou dados de casualidades. A fase de pronta resposta é similar à mesma fase aplicada para materiais perigosos (HAZMAT) ou outra ação de emergência tomada para estabilizar ou isolar o incidente e cuidar das casualidades. A fase de caracterização foca na determinação dos parâmetros locais chaves, incluindo tempo de desenvolvimento, extensão da contaminação e avaliação dos riscos potenciais às pessoas e ao meio ambiente. A fase final de reparação envolve a seleção de local específico para descontaminação de reagentes, se necessário, e amostragem para verificar que todos os tópicos ambientais de vida longa (persistentes) tenham sido encaminhados e se a solução está dentro dos padrões regulatórios. Apesar de todos os grandes avanços em todas estas áreas, vários problemas ainda limitam a habilidade de prever, preparar, detectar e responder ao terrorismo químico e biológico. A fase de caracterização requer métodos e modelos para prever o transporte do agente pelo ambiente, a extensão da contaminação, a duração da contaminação e as melhores rotas para as equipes de socorro. É neste ponto que se insere o contexto deste trabalho.

Os métodos CFD são ferramentas que podem ser utilizadas para compreender fluxos tridimensionais associados a distribuições de concentrações de substâncias químicas liberadas em ambientes

urbanos complexos. Estes métodos têm custo computacional elevado e somente nos últimos anos, com o advento de processadores mais velozes, a técnica se tornou viável. Alternativamente aos métodos CFD, que exigem muito tempo de cálculo computacional, vêm sendo desenvolvidas pesquisas utilizando técnicas de inferência Bayesiana alimentadas por dados provenientes de redes de sensores. Obviamente, redes de sensores com resolução suficiente para prover dados confiáveis têm custo elevado.<sup>17</sup>

Outra alternativa é o desenvolvimento de modelos de dispersão simplificados, como o desenvolvido pela *Environmental Protection Agency* (EPA) dos EUA em conjunto com o *National Atmospheric and Oceanic Administration* que usa o *Areal Locations of Hazardous Atmospheres* (ALOHA). Outro exemplo é o desenvolvido pelo *U.S. Department of Homeland Security* (DHS) por meio do *National Atmospheric Release Advisory* (NARAC).

O DHS subsidia estudos de novas estratégias e tecnologias, envolvendo simulações por métodos CFD e redes neurais, para monitorar metrô, aeroportos e outras estruturas operacionais de impactos econômicos consideráveis.<sup>17</sup>

A dispersão de agentes químicos ou biológicos pode ocorrer em três cenários distintos: interior (*indoor*), ambiente externo (*outdoor*) e ambiente semifechado (*semi-enclosed*). A diferenciação é importante devido ao meio em que vai ocorrer a dispersão. Em um ambiente aberto, deverão ser consideradas características da atmosfera, ou seja, o conhecimento da micrometeorologia: velocidade do vento, umidade e, até mesmo, a turbulência gerada pelos edifícios e construções.<sup>18</sup> Já em ambientes fechados prevalecem os estudos de HVAC (*Heating, Ventilation, and Air Conditioning*), ou seja, a interação de temperatura, velocidade e equipamentos de ar condicionado ou exaustão.<sup>19</sup>

#### 4. Exemplo: dispersão de gás cloro em estação de metrô

São aqui apresentados dois estudos de caso sobre dispersão de agentes químicos em uma estação de metrô da cidade do Rio de Janeiro. O objetivo do estudo foi verificar a eficiência das centrais de extração de fumaça (CEF) da estação para extrair os agentes químicos. As CEF são acionadas em regime de exaustão quando o incidente ocorre no nível inferior da estação, extraindo a fumaça pelas galerias, e em regime de insuflação quando o incidente ocorre no nível do mezanino, extraindo a fumaça pelos acessos à estação.

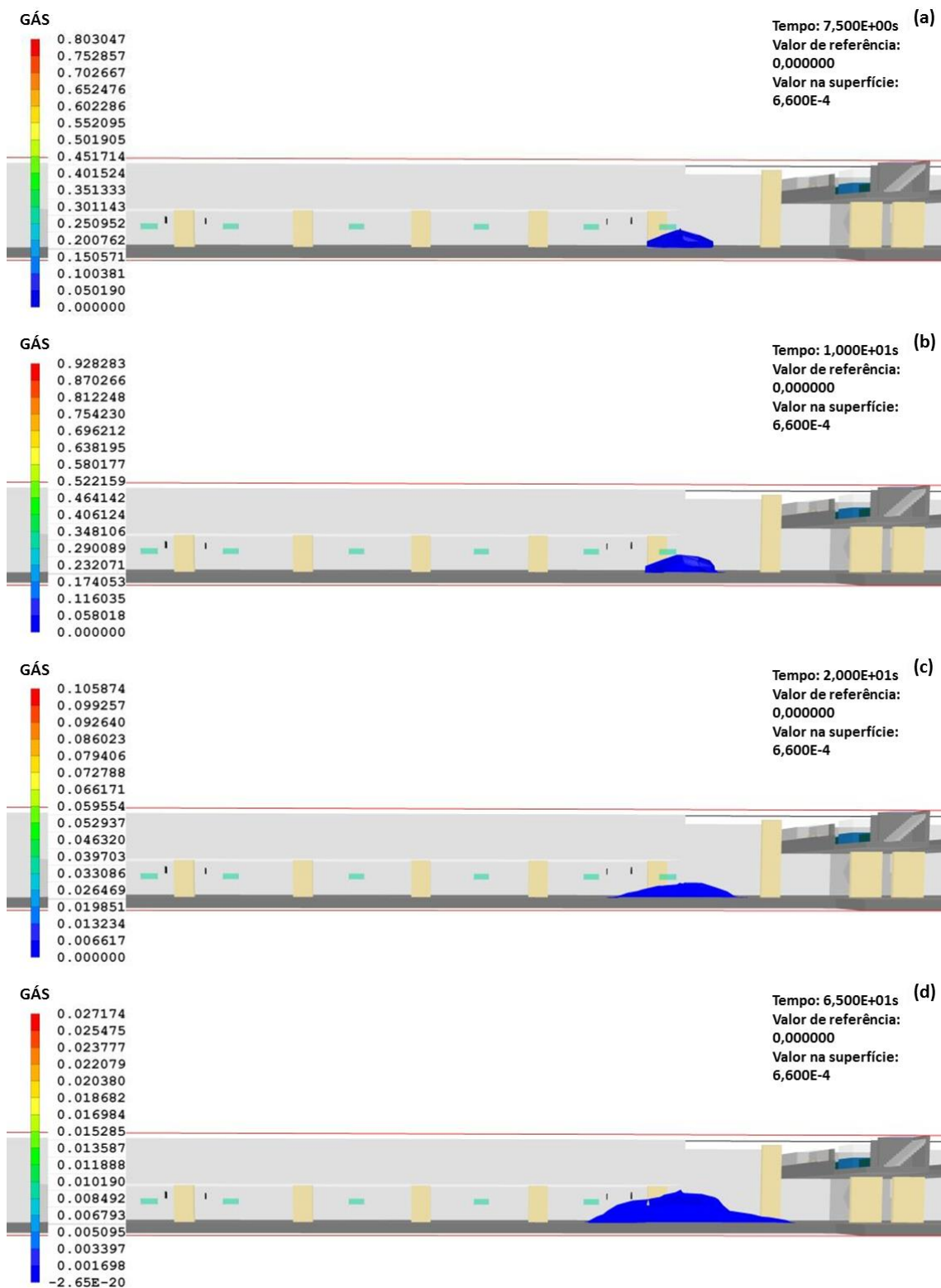
Foi avaliado um evento composto por várias etapas. Uma primeira simulação foi feita para calcular as velocidades que se estabelecem somente com os ventiladores ligados. O contaminante é então liberado durante os passos de tempo compreendidos entre 5 e 10 segundos. Foi assumido que o tempo necessário para que a contaminação fosse detectada e as primeiras medidas de contenção fossem tomadas seria de 1 minuto após o início da liberação de gás. Durante este primeiro minuto o gás se espalha sob a ação da difusão molecular e da convecção gerada pelos ventiladores de parede.

As superfícies de isoconcentração de gás cloro em diversos tempos da simulação estão apresentadas na Figura 1. A concentração

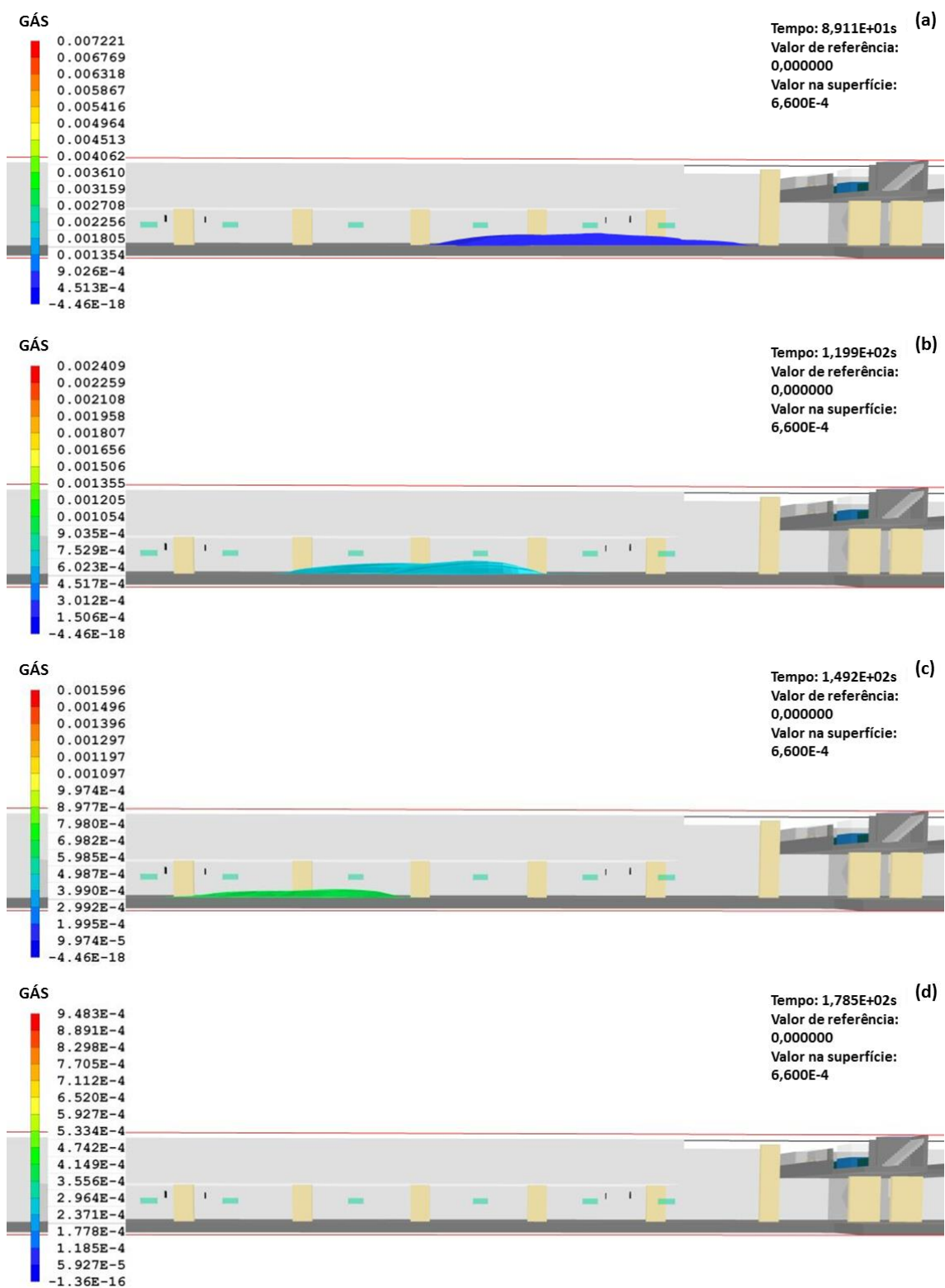
escolhida como concentração de segurança foi a fração molar de 6,  $6 \times 10^{-4}$ , o que corresponde a dez minutos de exposição para atingir a dose letal em 50% da população exposta ( $LD_{50}$ ). Estão apresentados os tempos de 7,5; 10; 20 e 65 s. Neste período, as CEF permanecem inativas e o gás se dispersa por difusão e pela convecção geradas pelos ventiladores de parede.

Na Figura 2 são mostrados os tempos de 90, 120, 150 e 180 s. Neste período, as CEF são acionadas e pode-se ver o deslocamento da superfície de isoconcentração em direção à galeria norte, bem como o efeito da diluição do agente químico que pode ser constatado pela variação da escala de concentrações. Ao fim de 180 s todo o cloro foi extraído da plataforma, comprovando a eficiência da CEF neste caso.

Assim como na simulação anterior, utilizou-se como condição inicial o valor do campo de velocidades e do campo de pressões obtido previamente. Durante as simulações, o contaminante foi liberado em um ponto do mezanino a partir dos 5 s até o fim da simulação, o que se deu com 240 s. Foi mantida a hipótese de que o tempo necessário para que a contaminação fosse detectada e as primeiras medidas de contenção fossem tomadas seria de 1 minuto após o início da liberação de gás. Durante este primeiro minuto o gás se espalha sob a ação da difusão molecular e da convecção gerada pelos ventiladores de parede.



**Figura 1.** Superfícies de isoconcentração de gás cloro na fase de dispersão nos tempos:<sup>7</sup> (a) 7,5 s; (b) 10,0 s; (c) 20,0 s e (d) 65,0 s



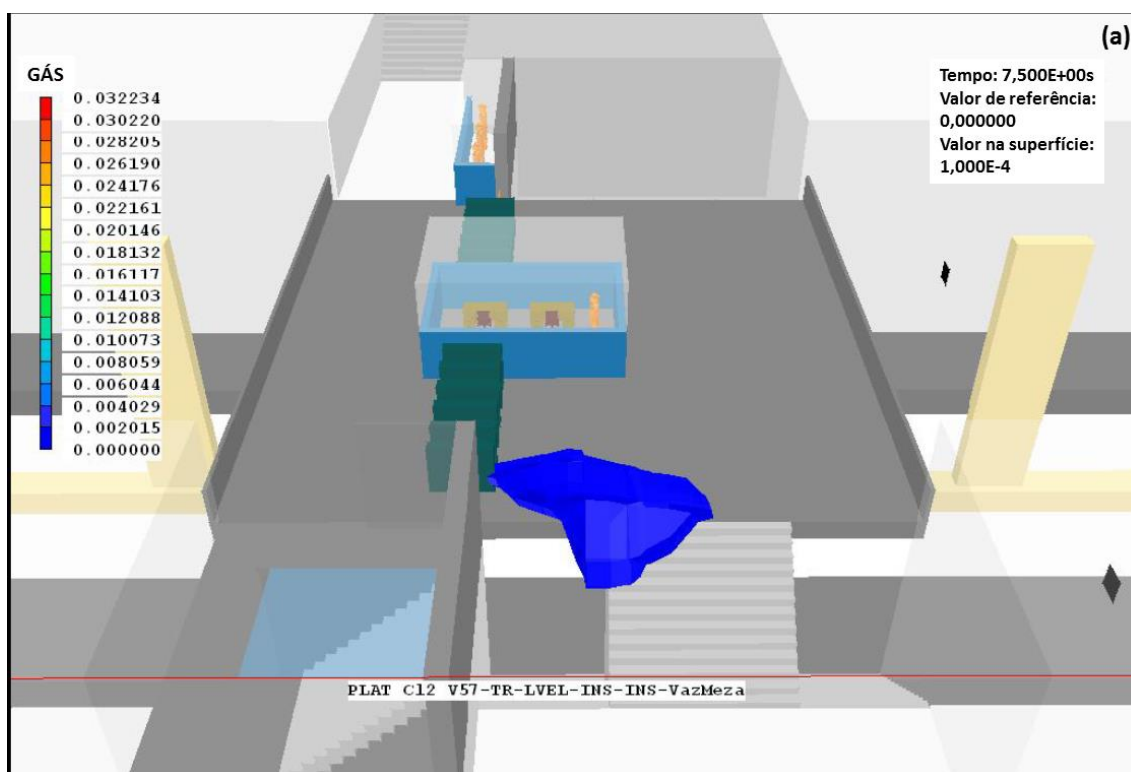
**Figura 2.** Superfícies de isoconcentração de gás cloro na fase na fase de acionamento do sistema de exaustão:<sup>7</sup>(a) 90 s; (b) 120,0 s; (c) 150,0 s; (d) 180,0 s

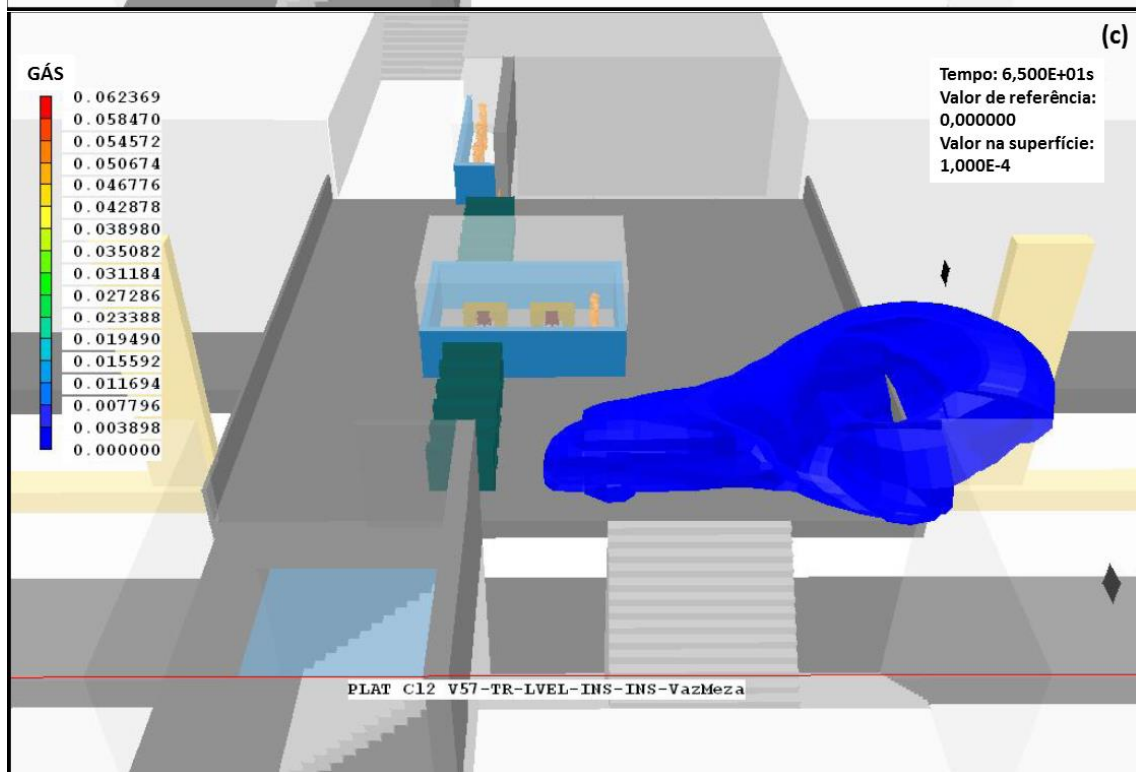
Nas Figuras 3 e 4 têm-se as superfícies de isoconcentração do gás cloro em diversos tempos da simulação. A concentração escolhida como concentração de segurança foi a fração molar de  $1,0 \times 10^{-4}$ , o que corresponde a aproximadamente uma hora de exposição para atingir a  $LD_{50}$ . Na Figura 3 são mostradas as isosuperfícies para os tempos de 7,5; 40; 65 e 70 s, e na Figura 4 são mostradas as isosuperfícies para os tempos de 80; 105; 120 e 240 s.

É possível observar que nos tempos até 65 s o gás se dispersa lentamente sob a ação das forças difusivas e pelos poucos movimentos convectivos gerados pelos ventiladores de parede. A partir de 65 s o gás é expulso por um dos acessos por ação das CEF. Percebe-se que a partir de 180 s todo gás que é liberado flui diretamente para a referida saída, e pode-se considerar que o campo de concentrações se aproxima do estado

estacionário, não sofrendo modificações significativas a partir de então.

Os resultados mostram que em caso de liberação de agentes não persistentes na plataforma, sendo a CEF acionada em exaustão um minuto após a liberação, em alguns minutos todo o agente químico é extraído para as galerias. Quando a liberação do agente se passa no mezanino e as CEF são acionadas em regime de insuflação, a extração do agente químico se dá diretamente pelos acessos da estação, sendo lançado diretamente na atmosfera, podendo causar danos maiores à população local. Esta medida pode levar a contaminação dos arredores, uma zona residencial, aumentando os danos causados. Ainda, as equipes de socorro utilizam estes acessos para entrar na estação e socorrer os feridos, que por sua vez são evacuados pelos mesmos acessos.





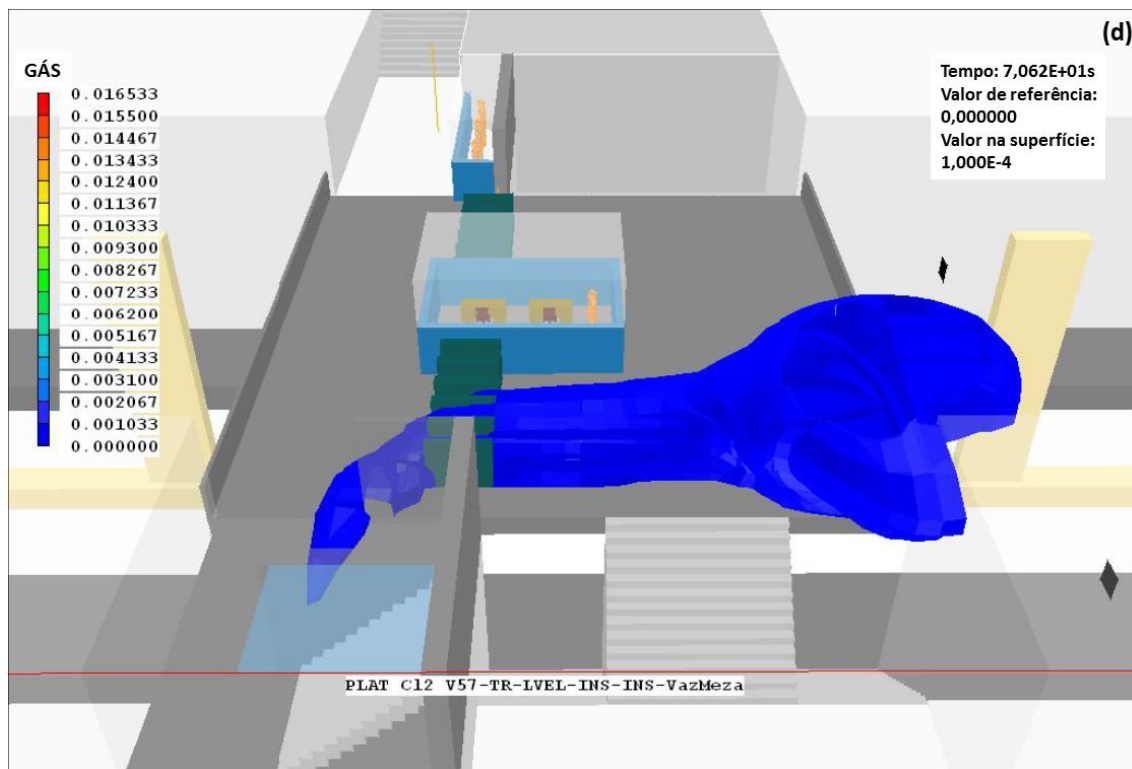
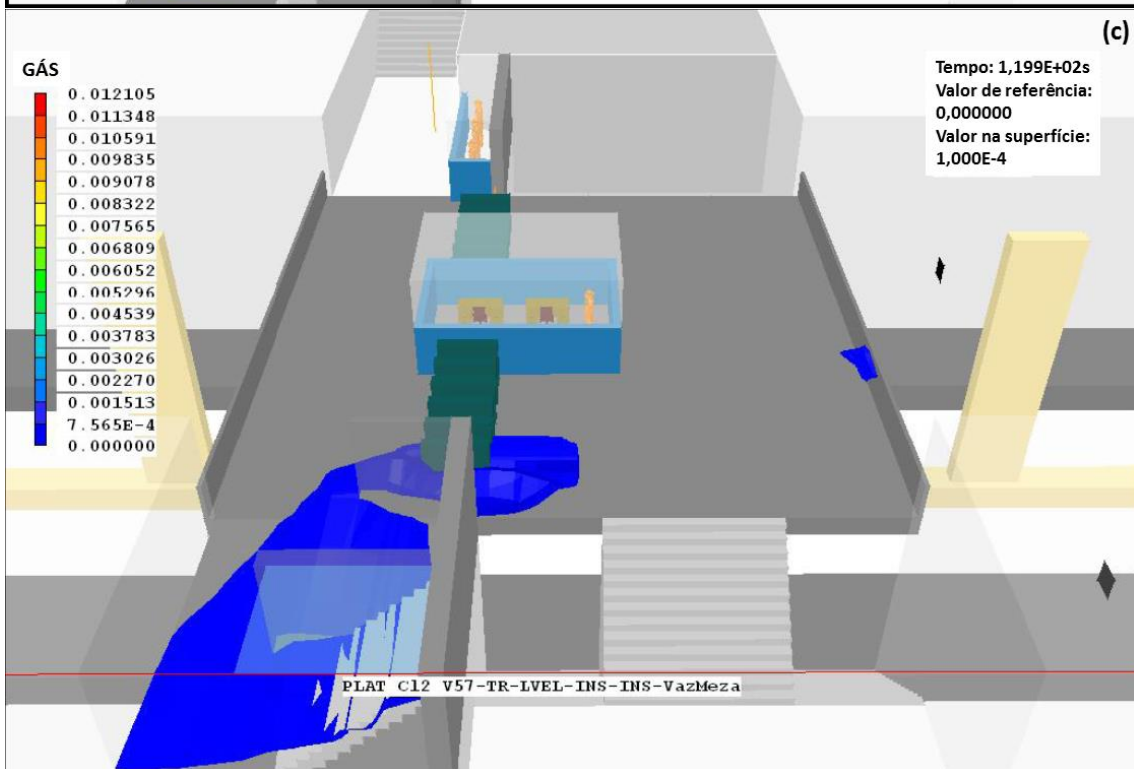
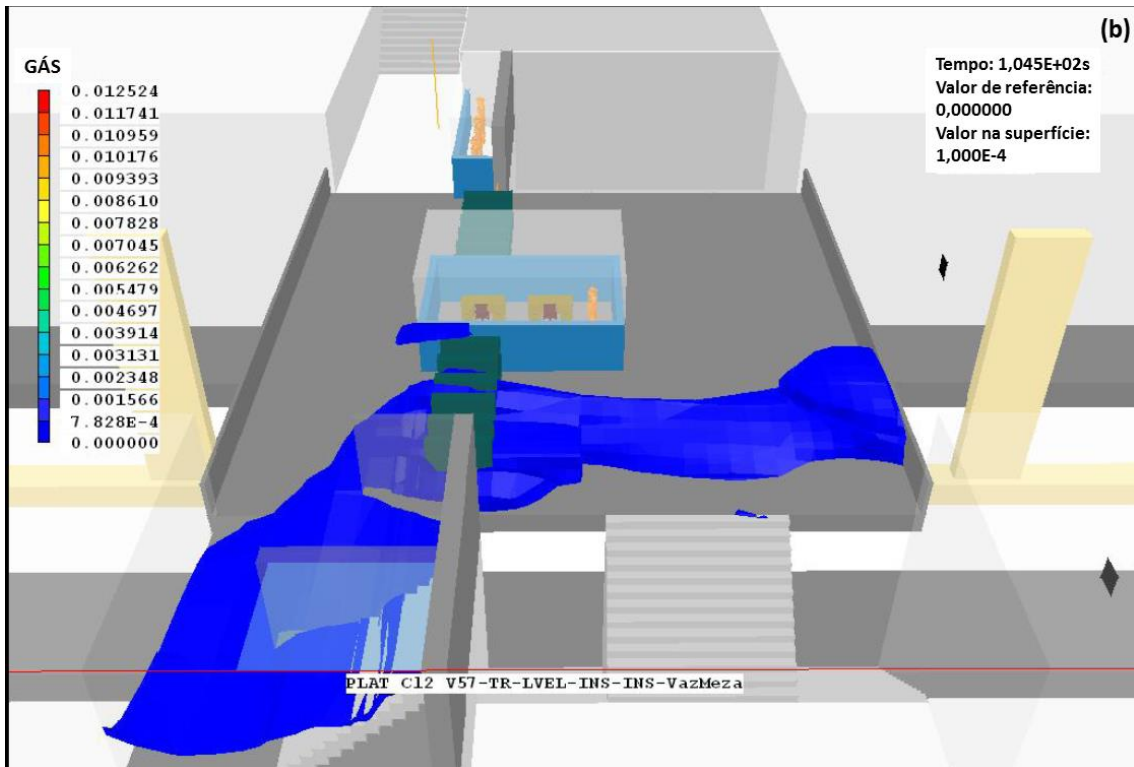
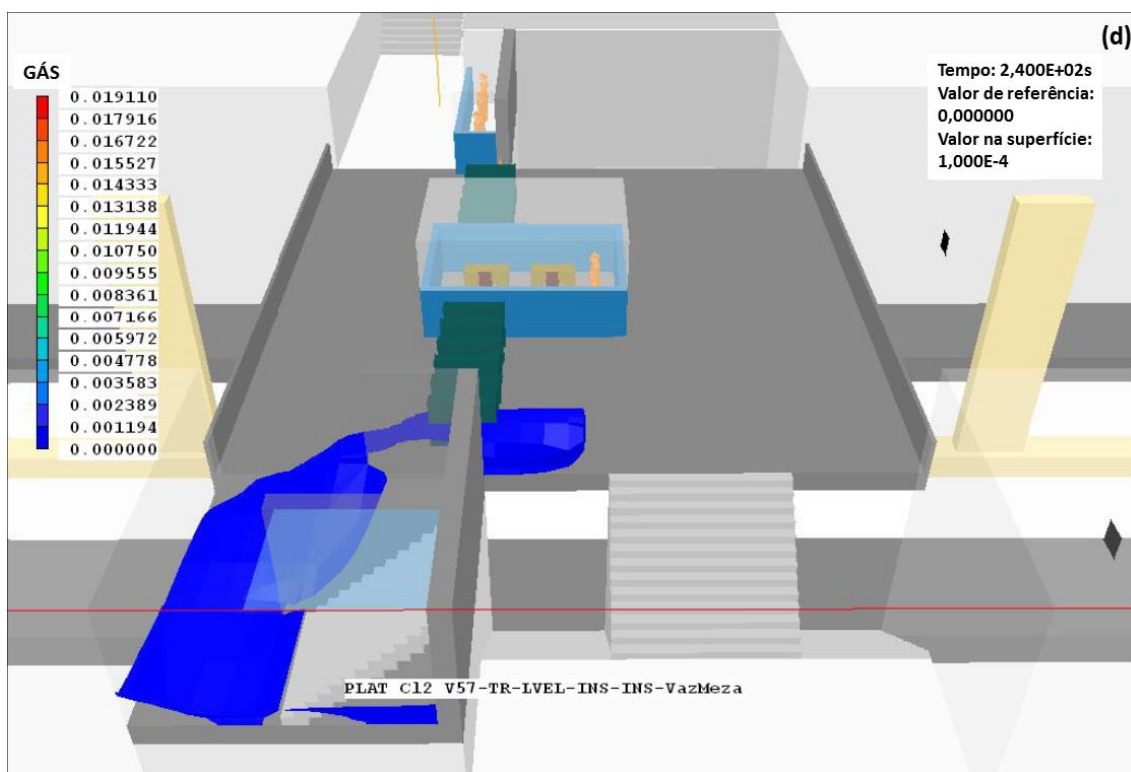


Figura 3. Superfícies de isoconcentração do gás cloro nos tempos:<sup>7</sup> (a) 7,5 s; (b) 40,0 s; (c) 65,5 s e (d) 70,0 s









**Figura 4.** Superfícies de isoconcentração do gás cloro nos tempos:<sup>7</sup> (a) 80 s; (b) 105 s; (c) 120 s; (e) 240 s

## 5. Conclusões

Existem diversos fenômenos na natureza que são regidos pelas equações de fenômenos de transporte. Por isso, foram desenvolvidas ferramentas matemáticas e computacionais para reproduzir estes fenômenos. Após o ataque terrorista de 11 de setembro nos Estados Unidos, a sociedade civil passou a participar mais ativamente das atividades de Defesa. O conhecimento dito dual pode ajudar em vários campos da Defesa.

A ferramenta de CFD é um exemplo de como o conhecimento científico pode ajudar diretamente na tomada de decisões pelos agentes competentes. No caso de um ataque químico ou biológico, é possível prever o transporte do agente pelo ambiente, a extensão da contaminação, a duração da contaminação e as melhores rotas para as equipes de socorro.

## Referências Bibliográficas

- <sup>1</sup> MD/MCT, Ministério da Defesa, Ministério de Ciência e Tecnologia, Concepção Estratégica – Ciência, Tecnologia e Inovação de Interesse de Defesa Nacional, 2004.
- <sup>2</sup> Versteeg, H.; Malalasekera, W.; An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method, 2a. Ed., Prentice Hall: London, 2007.
- <sup>3</sup> Freitas, G. C. S.; Peixoto, F. C.; Vianna Jr., A. S. Simulation of a thermal battery using Phoenix®. *Journal of Power Sources* **2008**, *179*, 424. [CrossRef]
- <sup>4</sup> Luz, H. Z. C.; Vianna Jr., A. S. CFD Simulation of a Mixing Tank. *International Review of Chemical Engineering (I.RE.CH.E.)* **2013**, *5*, 6. [Link]
- <sup>5</sup> Islabão, G. I.; *Tese de Doutorado*, Instituto Militar de Engenharia, 2011.
- <sup>6</sup> Peres, J. C. G.; Vianna Jr., A. S.; Simulating Phenol Oxidation in an Annular Photoreactor Using Computational Fluid Dynamics. *AICHE Meeting*, San Francisco, EUA, 2013. [Link]

- <sup>7</sup> Radusweski, L.; Vianna Jr., A. S. Gas Agent Release Simulations Using CFD. *Latin American Applied Research* **2013**, *43*, 199. [Link]
- <sup>8</sup> Wilcox D. C. Turbulence Modeling for CFD, 3a. Ed., DCW Industries: Califórnia, 2006.
- <sup>9</sup> Aris, R.; Vector, Tensors and The Basic Equations of Fluid Dynamics, Dover, 1989.
- <sup>10</sup> Bird, R. B.; Stewart, W. E.; Lightfoot, E. N.; *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons: New York, 2002.
- <sup>11</sup> Sítio da Cham. Disponível em: <http://www.cham.co.uk>. Acesso em: 20 janeiro 2014.
- <sup>12</sup> Ottino, J. M. Mixing and chemical reactions a tutorial. *Chemical Engineering Science* **1994**, *49*, 4005. [CrossRef]
- <sup>13</sup> Tennekes, H.; Lumley, J. L. *A first course in turbulence*, The MIT Press: London, 1972.
- <sup>14</sup> Sítio da Ansys. Disponível em: <http://www.ansys.com>. Acesso em: 11 janeiro 2014.
- <sup>15</sup> Sítio da OpenMesh. Disponível em <http://www.openmesh.org/>. Acesso em: 11 janeiro 2014.
- <sup>16</sup> Vianna Jr., A. S.; Braga, C. P.; Freitas G. P. S.; Barros, R. L. D. CFD e o Ensino em Engenharia Química, *Revista Brasileira de Engenharia Química* **2006**, *22*, 20. [Link]
- <sup>17</sup> Fitch, J. E.; Raber, E.; Imbro D. R. Technology challenges in responding to biological or chemical attacks in the civilian sector *Science* **2003**, *302*, 1350. [CrossRef]
- <sup>18</sup> Tewari, M.; Kusaka, H.; Chen, F.; Coirier, W. J.; Andrzej, S. K.; Wyszogrodzki, A.; Warner, T. T. Impact of coupling a microscale computational fluid dynamics model with a mesoscale model on urban scale contaminant transport and dispersion. *Atmospheric Research* **2010**, *96*, 656. [CrossRef]
- <sup>19</sup> Zhao, B.; Li, X.; Chen, H.; Huang D. Determining ventilation strategy to defend indoor environment against contamination by integrated accessibility of contaminant source (IACS). *Building and Environment* **2004**, *39*, 1035. [CrossRef]