

Congresso ABRISCO 2017

O Uso de Ferramentas de CFD na Avaliação de Complexidades de Terreno em Análise Quantitativa de Risco

Márcio Piovezan Salazar

Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB)

LabRisco - Laboratório de Análise, Avaliação e Gerenciamento de Riscos

Escola Politécnica da Universidade de São Paulo - Departamento de Engenharia Naval e Oceânica

Marcelo Ramos Martins

LabRisco - Laboratório de Análise, Avaliação e Gerenciamento de Riscos

Escola Politécnica da Universidade de São Paulo - Departamento de Engenharia Naval e Oceânica

• OBJETIVOS DO TRABALHO

O armazenamento de produtos perigosos gera o chamado risco tecnológico que é considerado no licenciamento ambiental em São Paulo na Norma CETESB P4.261 – *Risco de acidente de origem tecnológica*.

Uma etapa crucial na determinação do risco tecnológico neste tipo de operação é a estimativa da área afetada no entorno do empreendimento que a executa por possíveis liberações acidentais.

Neste momento, o analista de risco se defronta com eventos que podem envolver a formação e posterior dispersão de uma nuvem de produto tóxico ou inflamável na atmosfera, e deve aplicar os denominados modelos de dispersão atmosférica, que são conjuntos de equações matemáticas que permitem a estimativa da evolução da nuvem em função de sua posição e do tempo em um dado cenário acidental.

Na conjuntura dos acidentes na indústria de processos na década de 80 houve um desenvolvimento intenso no estudo da dispersão atmosférica, em especial com gases densos, com a realização de vários testes de campo (Maplin Sands, de Burro, Coyote, por exemplo) e avanços significativos na modelagem física, levando ao desenvolvimento de uma diversidade de modelos que podem ser empregados em análise de risco.

Os modelos de dispersão usados nos estudos apresentados à CETESB são os chamados modelos integrais ou de similaridade, os quais empregam as equações de conservação em um formato simplificado.

Assim, estas simplificações levam a um conjunto de equações diferenciais ordinárias que permite a estimativa rápida da dispersão atmosférica, o que é bastante interessante do ponto de vista do analista de risco, tendo em vista a quantidade considerável de cenários envolvidos em um estudo deste tipo.

Entretanto, os modelos de similaridade não permitem a avaliação da dispersão em terrenos complexos, como o é o em ambiente urbano, que é exatamente o contexto envolvido na análise de risco. O efeito físico decorrente da interação da nuvem com possíveis obstáculos no trajeto da dispersão é reconhecidamente um processo complexo, que altera as condições de diluição e dificulta a sua simulação computacional.

Para abordar esta dificuldade de escoamentos em ambientes complexos e atrelada a maior velocidade computacional atualmente disponível, muitos trabalhos vêm sendo feito com a aplicação de códigos de fluidodinâmica computacional (CFD) na estimativa da dispersão atmosférica de liberações acidentais.

Neste sentido, este trabalho apresenta o uso de ferramenta de fluidodinâmica computacional (CFD), por meio do código FLACS, como uma alternativa aos modelos integrais para avaliação da área afetada por uma liberação acidental em um ambiente urbano, onde existe a presença de obstáculos como casas ou prédios de alturas variáveis, no escopo da análise de risco no licenciamento ambiental em São Paulo.

• DESCRIÇÃO DO TRABALHO REALIZADO

A Abordagem da Fluidodinâmica Computacional (CFD)

Os modelos usados no escopo do licenciamento ambiental em São Paulo e da Norma CETESB P4.261 são os modelos conhecidos como modelos integrais ou de similaridade, como, por exemplo, o Unified Dispersion Model (UDM) implementado no *software* Phast (Pandya *et al.*, 2012), o SLAB (Ermak, 1990) implementando por exemplo, no *software* Effects, ou mesmo o *software* livre ALOHA (Jones *et al.*, 2013) que utiliza uma forma modificada do DEGADIS, cujo diagrama esquemático apresentado na Figura 1 ilustra a estratégia de modelagem desta classe de modelos (Spicer; Havens, 1989), onde $C(x,y,z)$ é a concentração de contaminante.

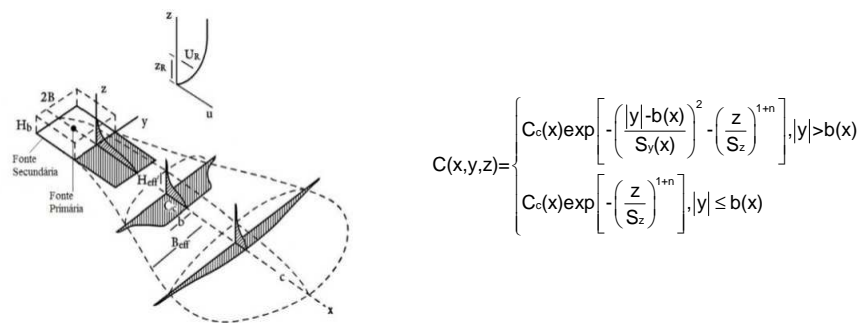


Figura 1 – Diagrama esquemático do DEGADIS (Spicer; Havens, 1989).

Estes modelos vêm sendo usados já há muitos anos e têm seu desempenho reconhecido na área de segurança de processo, oferecendo características bastante interessantes na análise de risco, como a baixa exigência de CPU e baixo tempo de processamento em sua execução.

Entretanto, estes modelos não permitem a inclusão de complexidades de terrenos frequentemente encontradas em ambientes urbanos (Meroney, 2012), como as vistas na Figura 2, não obstante permita, ainda, uma certa modulação deste terreno com o parâmetro comprimento de rugosidade da superfície, porém, com resultados superestimados (Pontiggia *et al.*, 2014).

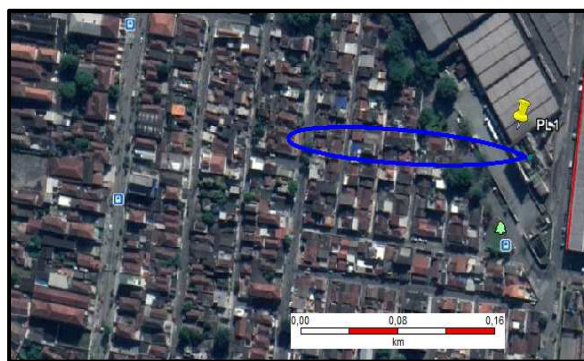


Figura 2 – Curva de isoconcentração gerada em modelo integral Phast.

A fluidodinâmica computacional (CFD) é uma técnica poderosa para análise de dinâmica de fluidos baseada na solução numérica das equações de transporte em uma malha computacional, o *mesh*.

Os modelos de fluidodinâmica computacional (CFD) são os modelos que proporcionam a descrição física mais completa e detalhada do fenômeno da dispersão atmosférica, em especial no que se refere um gás denso e seu processo peculiar de dispersão, permitindo, assim, que a dificuldade de modelagem em terrenos com presença de obstáculos encontradas em análise de risco possa ser superada (Koopman; Ermak, 2007).

Existem basicamente três técnicas de modelagem em CFD: a simulação numérica direta (DNS), a simulação de grandes escalas (LES) e a simulação das equações médias de Navier Stokes (RANS), disponíveis em uma diversidade de códigos de CFD, nas mais diversas aplicações de engenharia, sejam eles abertos ou comerciais (OpenFoam, CFX, FLACS, FDS, Fluent, entre outros).

A técnica mais utilizada em simulações da turbulência da camada limite atmosférica, proporcionando

resultados razoáveis e boa estabilidade na simulação (Luketa-Hanlin *et al.*, 2007), é a RANS, que resolve as médias da equação da continuidade, de Navier Stokes, de energia e conservação da espécie:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \mathbf{V}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\rho D\mathbf{V}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{V} + \rho \bar{\mathbf{g}} \quad (2)$$

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = k \nabla^2 T \quad (3)$$

$$\rho \frac{Dw_a}{Dt} = \rho D_a \nabla^2 w_a \quad (4)$$

Onde \mathbf{V} é o vetor velocidade, T é a temperatura da nuvem, w_a é a fração mássica da substância, D_a a sua difusividade mássica no ar, k a condutividade térmica e ρ a sua densidade.

A escolha específica do modelo de turbulência a ser usado no fechamento do conjunto de equações é um aspecto chave na simulação de dispersão atmosférica via fluidodinâmica computacional. Sklavounos e Rigas (2004) apresentam um resumo dos principais modelos para dispersão na presença de obstáculos.

O modelo de turbulência mais empregado e incorporado na maioria dos softwares de CFD é o chamado modelo de duas equações $k-\varepsilon$ (Pope, 2000), sendo o modelo mais validado e mais amplamente empregado em aplicações de engenharia (Luketa-Hanlin *et al.*, 2007).

Como em todo modelo de turbulência, o modelo $k-\varepsilon$ faz uso de coeficientes determinados empiricamente e pressupostos e aproximações empíricas para os termos modelados (Koopman; Ermak, 2007). Exceção à simulação DNS que resolve a equação de Navier Stokes sem o auxílio de modelagens de termos adicionais que surgem durante o processo de obtenção de sua média.

Assim, na modelagem RANS deve ser incluída uma equação adicional para a energia cinética turbulenta (k) e para a sua dissipação (ε) que contabilizam a criação (P), o transporte e a destruição de turbulência e, para o fechamento deste conjunto de equações, é incluído um modelo de viscosidade turbulenta (ν_τ).

$$\frac{Dk}{Dt} = \nabla \cdot \left(\frac{\nu_\tau}{\sigma_k} \nabla k \right) + P - \varepsilon \quad (5)$$

$$\frac{D\varepsilon}{Dt} = \nabla \cdot \left(\frac{\nu_\tau}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (6)$$

$$\nu_\tau = C_\mu k^2 / \varepsilon \quad (7)$$

As constantes adotadas no FLACS para o modelo são: $C_\mu = 0,09$, $C_{\varepsilon 1} = 1,44$, $C_{\varepsilon 2} = 1,92$, $\sigma_k = 1,0$ e $\sigma_\varepsilon = 1,3$, embora haja sugestão para adoção de outros valores (Alinot; Mason, 2005).

O uso de modelagem RANS com fechamento de turbulência $k-\varepsilon$ é bastante extensivo na literatura da dispersão atmosférica como usado em Pontiggia *et al.* (2014), Bubbico *et al.* (2014) e Liu (2016).

Materiais e Métodos

O código de CFD usado neste trabalho é o FLACS, desenvolvido pela empresa norueguesa Gexcon. O FLACS é um código desenvolvido especialmente para ser aplicado em segurança de processo. O código permite o estudo de aspectos como:

- Dispersão de gases inflamáveis ou tóxicos;
- Explosão de gases ou pós;
- Propagação de ondas de sobrepressão;
- Incêndios em jatos ou poças.

O FLACS estima a dispersão atmosférica de liberações acidentais resolvendo as médias de Reynolds das equações de Navier – Stokes (RANS) nas três dimensões (3D) pelo método dos volumes finitos em uma malha cartesiana não uniforme adotando o modelo de duas equações $k-\varepsilon$ para o fechamento da turbulência.

O FLACS foi desenvolvido no início dos anos 80 inicialmente para simulações envolvendo explosões em

instalações de produção de petróleo e gás em plataformas *offshore*, se expandindo posteriormente para outras áreas apoiada em forte trabalho de validação (Hansen, 2010).

A substância a ser estudada neste trabalho é a amônia, em função de se comportar como um gás denso em liberações acidentais a partir do armazenamento em tanques pressurizados (Kaiser; Walker, 1978) e de seu grande emprego industrial, sendo frequentemente estudada nos estudos de risco apresentados à CETESB.

O cenário avaliado é liberação acidental de amônia na fase vapor.

As condições empregadas nas simulações deste trabalho são as apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1 - Dados de entrada para simular a liberação de amônia.

Parâmetros de condição meteorológica	Valor
Duração da liberação [s]	60
Estado físico da substância	Gás
Direção da liberação	Horizontal
Altura da liberação [m]	1

As condições meteorológicas usadas são as na Norma CETESB P4.261, conforme Tabela 2.

Tabela 2 - Condições meteorológicas para simulações.

Parâmetros de condição meteorológica	Valor
Temperatura ambiente [°C]	20
Velocidade do vento [m/s]	2,0
Categoria de estabilidade atmosférica (escala de Pasquill)	E
Umidade relativa do ar [%]	80
Temperatura do solo [°C]	20

A região escolhida como objeto deste trabalho é a região apresentada na Figura 2: uma região no entorno de um empreendimento composta pela presença de obstáculos com diferentes alturas e larguras, tipicamente urbana (casas, prédios, ruas) e frequentemente encontrada nos estudos de risco apresentados à CETESB.

O domínio simulado foi de 300 metros no caso sem obstrução e 200 metros nos cenários que levam em consideração a presença de casas, edifícios e paredes. As dimensões dos obstáculos foram selecionadas de forma a reproduzir os aspectos reais como na Figura 2 (Liu *et al.*, 2016). A taxa de liberação foi determinada inicialmente, simulando a liberação no *software* Phast nas condições da Tabela 2 (Pontiggia *et al.*, 2014).

• RESULTADOS OBTIDOS

A simulação feita no *software* FLACS em um ambiente sem presença de obstáculos, Figura 3, apresentou resultado bastante próximo do resultado obtido no modelo integral Phast, apresentado na Figura 2 para a concentração referente a 1% de probabilidade de fatalidade. Pode ser observado que as concentrações registradas nos pontos de monitoramento atingem concentrações constantes muito rapidamente.

Na Figura 4 estão apresentados os resultados da simulação na condição da Tabela 2; na Figura 5 estão os resultados desta dispersão considerando a velocidade do vento 4 m/s, onde observa-se maiores concentrações de amônia ao longo do eixo x. Na Figura 6 é considerado a presença de uma parede de 2m de altura, a 5 metros do ponto de liberação, simulando a existência dos muros em um empreendimento industrial.

Nas figuras a letra a) identifica a localização dos pontos de monitoramento (MP); a letra b) corresponde às concentrações nestes MP; as letras d) e e) apresentam às concentrações no eixo XZ e no eixo XY.

Como pode ser observado a presença dos obstáculos alterou radicalmente o perfil de concentração de amônia no entorno do vazamento. No caso mais extremo, esta concentração caiu de cerca de 22000 mg/m³ na condição sem obstáculos, Figura 3, para cerca de 1700 mg/m³ no ponto de monitoramento 1 (MP1) a 20 metros da fonte, como pode ser visto na Figura 6, que considera a presença de uma parede de 2 metros de altura entre o local do vazamento e suas vizinhanças. Pode ser observado que a nuvem atingiu alturas maiores após o contato com os obstáculos, como pode ser visto na Figura 4d, e que também, em decorrência de regiões de recirculação do escoamento, podem existir regiões de maior concentração em decorrência de obstáculos, como pode ser visto na Figura 6.

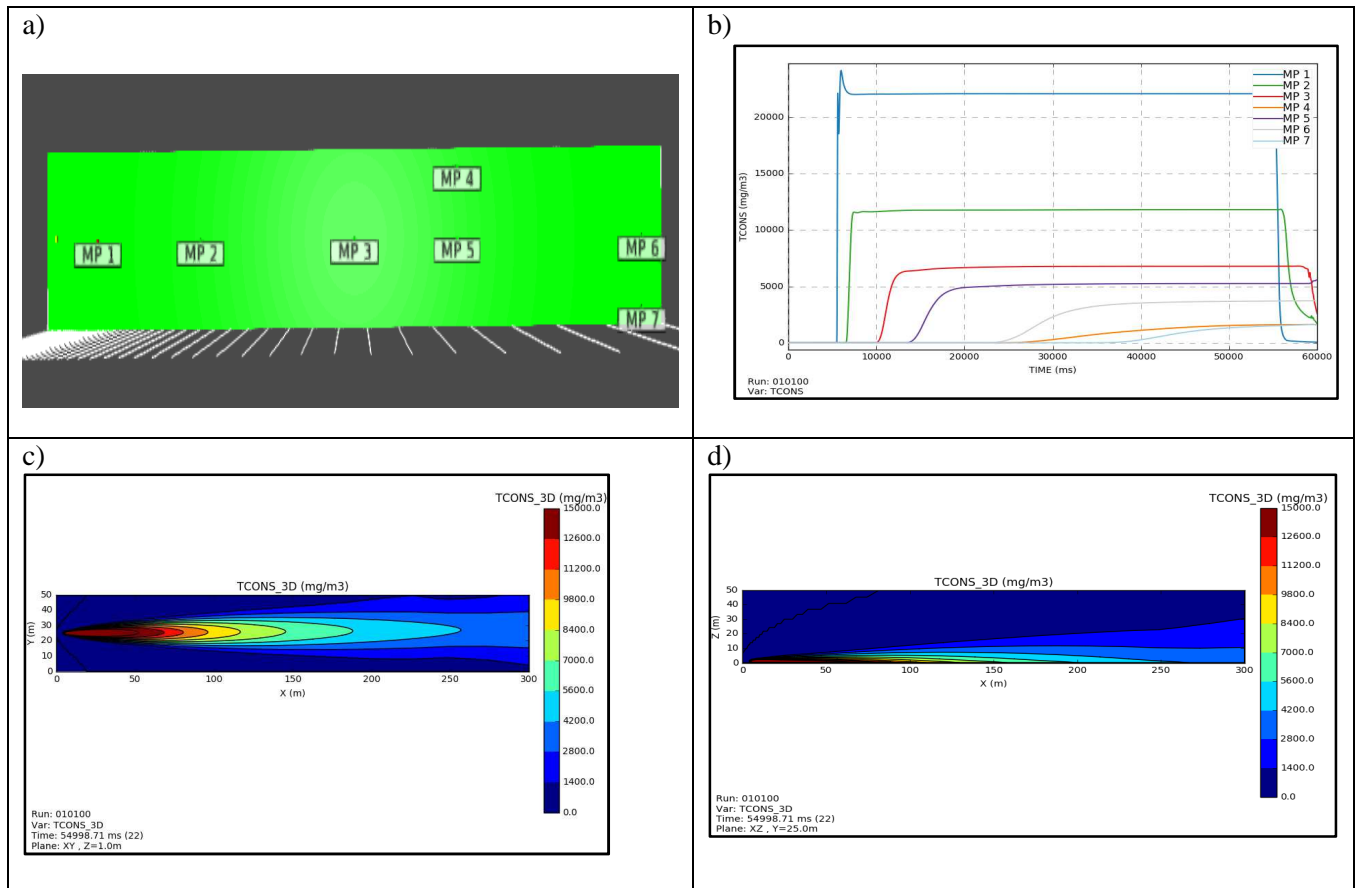


Figura 3 – Resultado sem obstáculos.

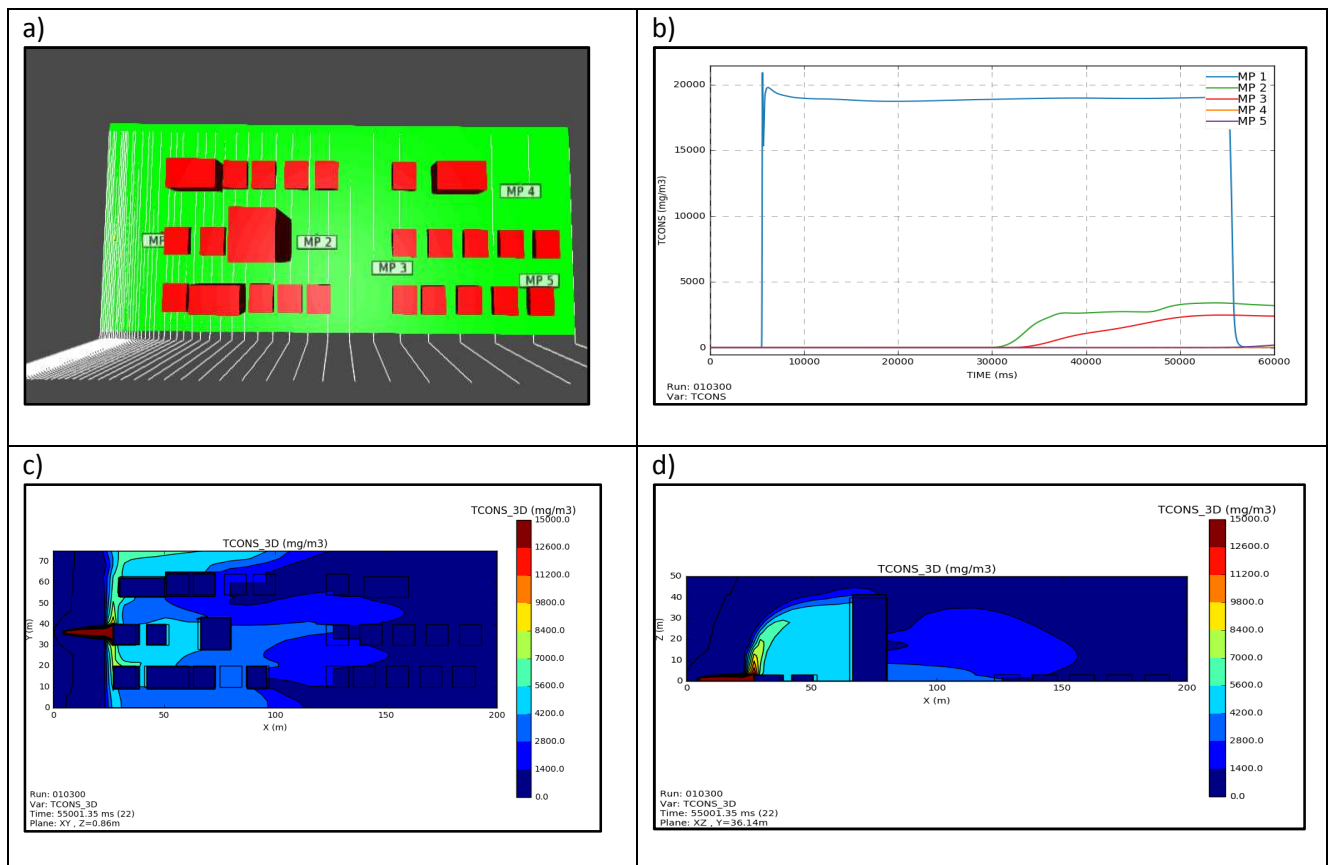


Figura 4 – Resultados com obstáculos, velocidade 2 m/s.

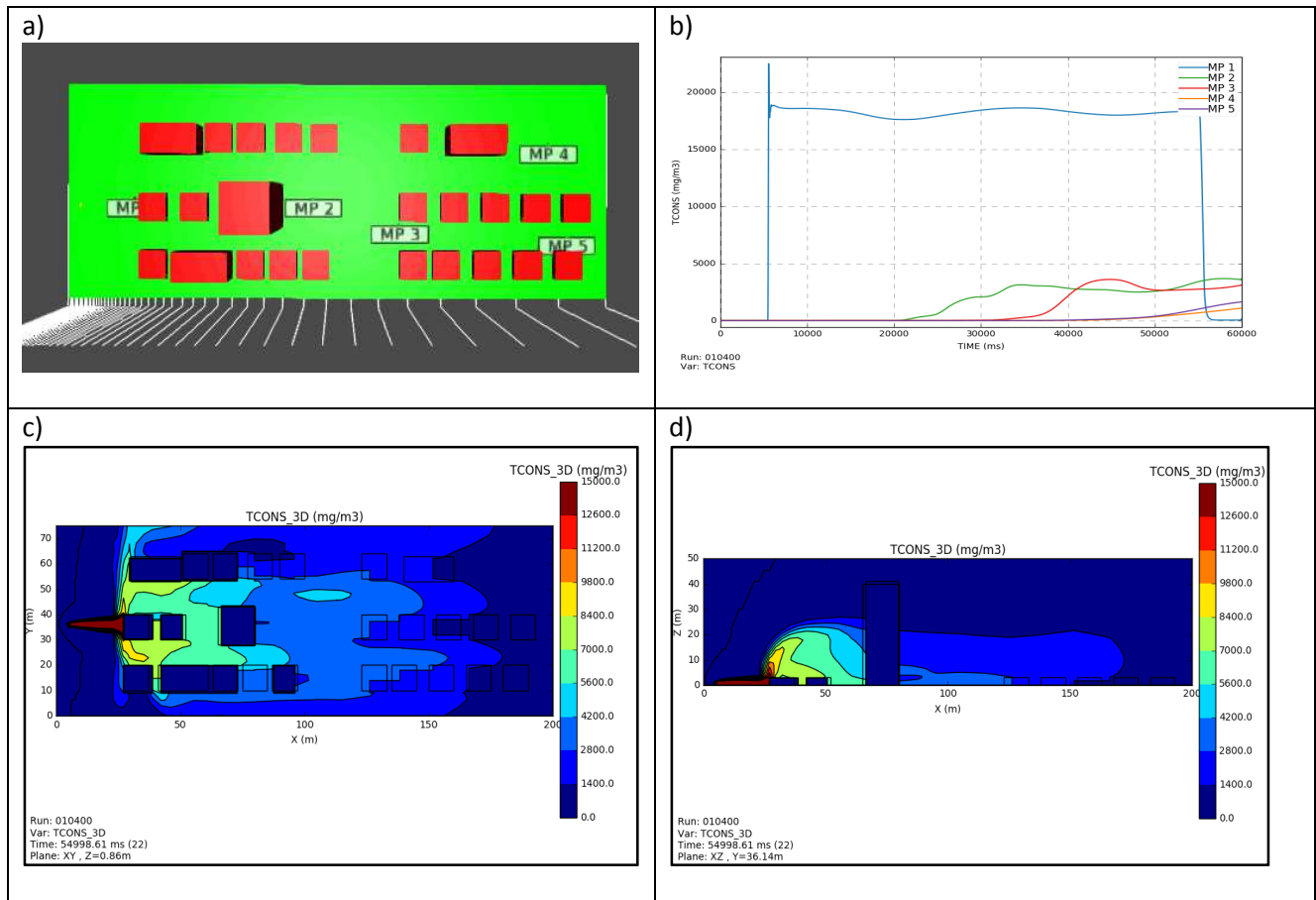


Figura 5 - Resultados com obstáculos, velocidade 4 m/s.

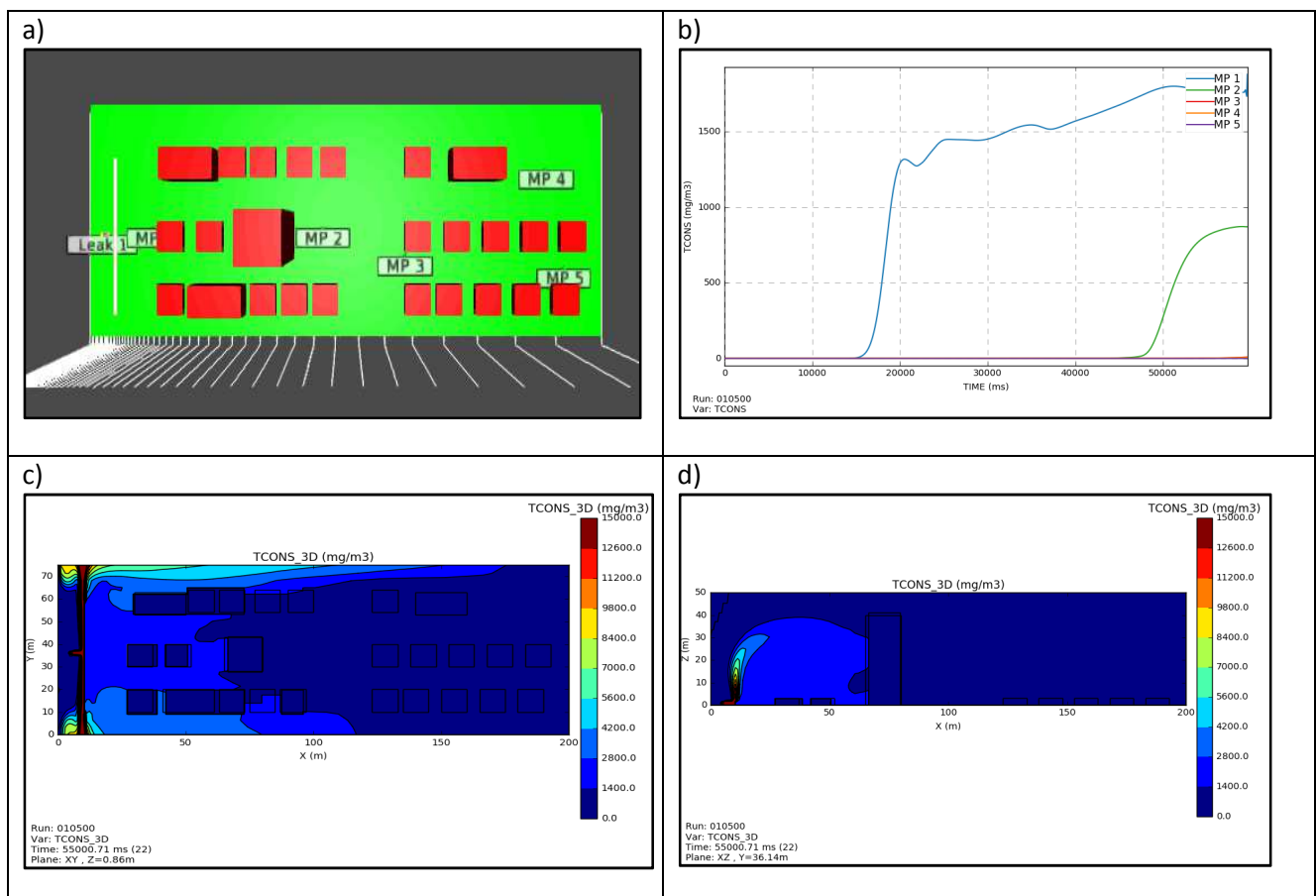


Figura 6 – Resultados com obstáculos, incluindo uma parede de 2 metros de altura antes do entorno.

• CONCLUSÕES

Este trabalho empregou o código de fluidodinâmica computacional (CFD) FLACS para avaliar a área afetada por uma liberação accidental em um ambiente complexo, um ambiente tipicamente urbano, frequentemente avaliado no escopo de análise de risco na CETESB, como alternativa aos modelos integrais ou de similaridade, que não permitem esta avaliação.

O ambiente urbano foi representado pela inclusão no domínio da simulação de figuras geométricas compatíveis com um ambiente real (altura e largura de casas, prédios, muros).

O código FLACS emprega a metodologia de média de Reynolds das equações de conservação (RANS) com fechamento de turbulência com modelo de duas equações $k-\varepsilon$.

Foi observado que a simulação via CFD permite, indubitavelmente, uma melhor análise do processo de dispersão, não obstante, exija, em contrapartida, um tempo maior para a execução das simulações.

O que se nota após as simulações da dispersão atmosférica com ou sem a presença de obstáculos é que a existência dos obstáculos no trajeto da nuvem pode alterar significativamente o perfil de concentração, não somente da direção horizontal, mas também na direção vertical, atuando como se fosse uma barreira à evolução da nuvem do material liberado acidentalmente.

No caso estudado neste trabalho, de uma maneira geral, a configuração do ambiente complexo agiu no sentido de redução das concentrações de amônia sentidas ao longo da região da dispersão.

Entretanto, podem existir regiões em que a alteração no escoamento devido à presença de obstáculos pode levar à maiores concentrações de contaminante, o que não permite, assim, de imediato, uma conclusão absoluta, quanto ao efeito da presença de obstáculos na concentração, devendo-se, assim, proceder à análise pontual para se chegar a esta conclusão.

REFERÊNCIAS

- Alinot, C., Masson, C. $k-\varepsilon$ model for the atmospheric boundary layer under various thermal stratifications. *Journal of Solar Energy engineering* 127: 438-443, 2005.
- Bubbico, R., Mazzarotta, B., Verdone, N. CFD analysis of the dispersion of toxic materials in road tunnels. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 28, 2014.
- DNV GL, 2015. More info on PHAST at <https://www.dnvgl.com/services/process-hazard-analysis-software-phast-1675>. Acesso em: 12 set. 2017.
- GexCon AS. FLACS v10.0 User's Manual, 2013.
- Ermak, D. L. Users Manual for SLAB: an atmospheric dispersion model for denser than air releases. UCRL-MA-105607, Lawrence Livermore National Lab, Livermore, Califórnia, 1990.
- Hansen, O. R.; Gavelli, F.; Ichard, M.; Davis, S. G. Validation of FLACS against experimental data sets from the model evaluation database for LNG vapor dispersion. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 23, 2010.
- Jones, R.; Lehr, W.; Simecek-Beatty, D.; Reynolds, R.M. ALOHA - Areal Locations of Hazardous Atmospheres 5.4.4 – Technical Documentation. U.S Dept. of Commerce, NOAA, 2013.
- Kaiser, G. D.; Walker, B. C. Releases of anhydrous ammonia from pressurized containers – the importance of denser-than-air mixtures. *Atmospheric Environment*, v. 12, 1978.
- Koopman, R.P.; Ermak, D.L. Lessons learned from LNG safety research. *Journal of Hazardous Materials* 140, 2007.
- Liu, B.; Liu, X.; Lu, C.; Godbole, A.; Michal, G.; Tieu, A.K. Computational fluid dynamics simulation of carbon dioxide dispersion in a complex environment. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 40, 2016.
- Luketa-Hanlin, A.; Koopman, R. P.; Ermak, D. L. On the application of computational fluid dynamics codes for liquefied natural gas dispersion. *Journal of Hazardous Materials*, v. 140, 2007.
- Meroney, R.N. CFD modelling of dense gas cloud dispersion over irregular terrain. *Journal of wind engineering and industrial aerodynamics* 104-106, 2012.
- Pandya, N.; Gabas, N.; Marsden, E. Sensitivity analysis of PHAST's atmospheric dispersion model for three toxic materials (nitric oxide, ammonia, chlorine). *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 25, 2012.
- Pontiggia, M.; Busini, V.; Ronzoni, M.; Ugucioni, G.; Rota, R. Effect of large obstacles on high momentum jets dispersion. *Chemical Engineering Transactions*, vol. 36, 2014.
- Pope, S.B. Turbulent flows, Cambridge University Press. 2000.
- Sklavounos, S.; Rigas, F. Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles. *Journal of*

Hazardous Materials, A108, 2004.

Spicer, T.; Havens, J. User's guide for DEGADIS 2.1 Dense gas dispersion model. 1989. Disponível em:
<https://www3.epa.gov/ttn/scram/dispersion_alt.htm#DEGADIS>. Acesso em: 12 set. 2017.