



# Simulação de Explosão Semiconfinada com Programa de CFD STOKES: Influência de Parâmetros Numéricos e Constantes do Modelo de Combustão BML

Estevão Gomes da Cruz Barreto

Projeto de Final de Curso

## **Orientadores**

Prof. Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

Prof. Tânia Suaiden Klein, Ph.D.

Prof. Sávio Souza Venancio Vianna, Ph.D.

Março, 2021

**Simulação de Explosão Semiconfinada com Programa de CFD  
STOKES: Influência de Parâmetros Numéricos e Constantes do  
Modelo de Combustão BML**

*Estevão Gomes da Cruz Barreto*

Projeto de Final de Curso submetida ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Aprovado por:

---

Carlos André Vaz Junior, D.Sc.

---

Tatiele Dalfior Ferreira, D.Sc.

Orientado por:

---

Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

---

Tânia Suaiden Klein, Ph.D.

---

Sávio Souza Venâncio Vianna, Ph.D.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil

Março, 2021

B273s Barreto, Estevão Gomes da Cruz.  
Simulação de Explosão Semiconfinada com Programa de CFD STOKES: Influência de Parâmetros Numéricos e Constantes do Modelo de Combustão BML / Estevão Gomes da Cruz Barreto. – 2021.  
69 f.: il.  
Orientador: Ricardo de Andrade Medronho.  
Coorientadora: Tânia Suaiden Klein.  
Coorientador: Sávio Souza Venâncio Vianna.  
Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Bacharel em Engenharia Química, Rio de Janeiro, 2021.  
1. Explosão. 2. Simulação Numérica. 3. Fluidodinâmica Computacional. I. Título.

## AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer a Deus, que sempre se mostrou presente em minha vida, guiando as minhas escolhas e abrindo os caminhos.

Agradeço aos meu pais, Marcos Barreto e Sandra Barreto, por toda a dedicação, carinho e cuidado na minha formação como pessoa. No entanto, gostaria de agradecer principalmente à minha mãe amada, Sandra Barreto, esta mulher guerreira e sonhadora, que semeou em mim uma vontade incessante de vencer, que permeou pelos mais diversos aspectos da minha vida. Mãe, tenho orgulho de dizer que esta conquista foi por você.

Agradeço aos meu irmãos, David Barreto e Filipe Barreto, que os olhares de orgulho e admiração sempre me impulsionaram a seguir em frente. Agradeço aos demais familiares, das famílias Gomes e Barreto, que torceram por mim. Um agradecimento especial às minhas tias Margarida Póvoa e Sol Gomes, que se encheram de orgulho em cada uma das minhas conquistas; e ao meu tio Marciano Barreto, que sempre serviu de inspiração para mim.

Gostaria de agradecer à minha namorada, Thaysa Raposo, por estar sempre ao meu lado, pela paciência para me ouvir e por nunca esconder a admiração que sente por mim.

Agradeço à Julieta Vianna, que nunca mediu esforços para impulsionar o meu desenvolvimento acadêmico. Espero um dia poder fazer por alguém o que você fez por mim.

Agradeço à Aracinda Alves por todo o carinho e pelas orações.

Agradeço à professora Mariusa Sodr  por ter me inspirado ainda t o cedo.

Agradeço   todos os amigos incr veis que a UFRJ me proporcionou, sem os quais este caminho teria sido muito mais dif cil. Um agradecimento especial aos amigos Tauan Pereira, Ariane Amaral e Ramon Moreira, com os quais eu sempre pude contar, que estiveram presentes nos momentos mais felizes e t m tamb m nos mais dif ceis.

Finalmente, agradeço aos meu orientadores, Ricardo Medronho, T nia Klein e S vio Vianna, por toda paci ncia, dedica o e por terem me orientado de forma exemplar. Voc s s o grades exemplos de profissionais.

Este trabalho marca a minha forma o como engenheiro qu mico, por m a minha forma o como ser humano envolve todos os citados acima e muitos outros. Muito obrigado!

## RESUMO

### **Simulação de Explosão Semiconfinada com Programa de CFD STOKES: Influência de Parâmetros Numéricos e Constantes do Modelo de Combustão BML**

Estevão Gomes da Cruz Barreto

Explosões de nuvem de vapor não confinadas são um dos perigos químicos mais comuns encontrados em plantas industriais. Explosões podem ser definidas como uma rápida expansão gasosa, resultando em uma onda de choque, podendo ser originada de forma mecânica ou por uma rápida reação exotérmica. Dada a severidade de suas consequências, ser capaz de modelar o fenômeno da explosão com acurácia é de extrema importância para garantir uma operação segura das plantas industriais. O presente trabalho teve como objetivo simular numericamente, através do método de Fluidodinâmica Computacional (CFD), uma explosão semiconfinada com obstáculos, em pequena escala, utilizando o programa STOKES, desenvolvido pela UNICAMP. A influência de parâmetros numéricos gerais de uma simulação de CFD (número de Courant-Fredrichs-Lewy (CFL) e *Smooth Factor* (SF)) e parâmetros específicos do modelo de combustão de Bray, Moss e Libby (BML) (constante  $c_L$ , fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$  e constante  $g$ ) foi avaliada. Os resultados foram comparados com dados experimentais da literatura e com resultados obtidos com o programa FLACS<sup>®</sup>, referência de mercado em simulações de explosão em grande escala. O STOKES se mostrou eficaz ao simular o experimento da câmara de combustão semiconfinada com obstáculos, sendo possível obter resultados com comportamento qualitativamente similar aos experimentais. No entanto, não foi possível obter um chama que apresentasse um adiantamento menor que 12,0 ms, em relação aos dados experimentais. Em relação a reprodução do experimento sob análise, que é considerado uma explosão em pequena escala, o STOKES obteve melhores resultados que o programa FLACS<sup>®</sup>. Foi possível demonstrar também que os três parâmetros avaliados no modelo de combustão BML influenciam as simulações de explosão de forma conjunta, através de uma constante única, aqui denominada constante geral  $K$ .

Março, 2021

Orientadores: Prof. Ricardo de Andrade Medronho  
Prof. Tânia Suaiden Klein  
Prof. Sávio Souza Venâncio Vianna

## ABSTRACT

### **Semi-confined Explosion Simulation with CFD Software STOKES: Influence of Numerical Parameters and Constants of the BML Combustion Model**

Estevão Gomes da Cruz Barreto

Unconfined vapor cloud explosions are one of the most common chemical hazards found in industrial plants. An explosion can be defined as a rapid gas expansion, resulting in a shock wave, which can be caused mechanically or by a rapid exothermic reaction. Given the severity of its consequences, accurately modelling the explosion phenomenon is critical to ensure a safe operation of industrial plants. The present work aimed to numerically simulate, applying the Computational Fluid Dynamics (CFD) method, a semi-confined explosion with obstacles, on a small scale, using the software STOKES, developed by UNICAMP. The influence of general numerical parameters of a CFD simulation (Courant-Fredrichs-Lewy (CFL) number and Smooth Factor (SF)) and specific parameters of the Bray, Moss and Libby (BML) combustion model (constant  $c_L$ , flame orientation factor  $|\hat{\sigma}_y|$  and constant  $g$ ) were assessed. The results were compared with literature experimental data and with results obtained with the software FLACS<sup>®</sup>, a benchmark in large-scale explosion simulations. STOKES proved to be effective in simulating the semi-confined combustion chamber with obstacles experiment, being possible to obtain results with behavior qualitatively similar to the experimental ones. However, it was not possible to obtain a flame that presented an advance lower than 12.0 ms, in relation to the experimental data. Regarding the reproduction of the experiment under analysis, which is considered a small-scale explosion, STOKES obtained better results than the software FLACS<sup>®</sup>. It was also possible to demonstrate that the three assessed parameters in the BML combustion model influence the explosion simulations together, through a single constant, here called the general constant  $K$ .

March, 2021

Orientadores: Prof. Ricardo de Andrade Medronho  
Prof. Tânia Suaiden Klein  
Prof. Sávio Souza Venâncio Vianna

## ÍNDICE

1.	INTRODUÇÃO.....	1
1.1.	OBJETIVO .....	3
2.	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....	4
2.1.	SEGURANÇA DE PROCESSOS E AVALIAÇÃO DE RISCOS.....	4
2.2.	INCENDIOS E EXPLOSÕES .....	5
2.3.	MODELAGEM MATEMÁTICA .....	7
2.4.	FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL E MÉTODOS DO VOLUMES FINITOS.....	9
2.5.	CARACTERÍSTICAS DOS ESQUEMAS NUMÉRICOS .....	10
2.6.	MODELAGEM DA TURBULÊNCIA .....	12
2.7.	CONCEITO DE POROSIDADE.....	15
2.8.	MÉDIA DE FAVRE.....	16
2.9.	CHAMA PRÉ-MISTURADA E MODELAGEM DA COMBUSTÃO.....	18
2.10.	PACOTES DE CFD PARA EXPLOSÃO .....	23
2.11.	VALIDAÇÃO COM DADOS EXPERIMENTAIS .....	24
3.	METODOLOGIA.....	27
3.1.	TESTE DE MALHA .....	28
3.2.	PARÂMETROS PRELIMINARES .....	30
3.3.	PARÂMETROS DO MODELO DE COMBUSTÃO .....	31
4.	RESULTADOS E DISCUSSÃO .....	33
4.1.	RESULTADOS DO TESTE DE MALHA.....	33
4.2.	AVALIAÇÕES PRELIMINARES.....	35
4.2.1.	Número de Courant-Fredrichs-Lewy (CFL).....	35
4.2.2.	Smooth Factor (SF) .....	38
4.3.	AVALIAÇÃO DO MODELO DE COMBUSTÃO .....	40
4.3.1.	Constante $C_L$ .....	40
4.3.2.	Fator de Orientação da Chama ( $\sigma_y$ ).....	43
4.3.3.	Constante $g$ .....	46
4.4.	NOVA ABORDAGEM PARA AVALIAÇÃO DO MODELO DE COMBUSTÃO – CONSTANTE GERAL K .....	48
4.5.	COMPARAÇÃO ENTRE STOKES E FLACS® .....	51
5.	CONCLUSÕES .....	54

5.1. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS .....	56
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	57



## ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 - Representação da câmara de combustão. Baseada em FERREIRA <i>et al.</i> (2019). ...	27
Figura 2 - Resultados variando a discretização espacial $\Delta x$ : (a) 2,0 mm. (b) 3,0 mm. (c) 4,0 mm. (d) 5,0 mm. (e) Experimento - DI SARLI <i>et al.</i> (2009). .....	35
Figura 3 - Avanço da chama variando a discretização espacial. ....	35
Figura 4 - Resultados variando CFL: (a) 0,1. (b) 0,4. (c) 0,7. (d) 1,0. (e) Experimento - DI SARLI <i>et al.</i> (2009). .....	37
Figura 5 - Avanço da chama variando o CFL. ....	37
Figura 6 - Resultados variando o <i>smooth factor</i> (SF): (a) 0,01. (b) 0,03. (c) 0,05. (d) 0,07. (e) Experimento - DI SARLI <i>et al.</i> (2009). .....	39
Figura 7 - Avanço da chama variando o SF. ....	40
Figura 8 - Resultados variando a constante $cL$ : (a) 0,23. (b) 1,0. (c) 1,5. (d) 2,0. (e) 3,0. (f) 5,0. (g) 12,3. (h) Experimento - DI SARLI <i>et al.</i> (2009). ....	42
Figura 9 - Avanço da chama variando a constante $cL$ . .....	42
Figura 10 - Resultados variando o fator de orientação da chama $\sigma_y$ : (a) 0,3. (b) 0,5. (c) 0,7. (d) 1,0. (e) Experimento - DI SARLI <i>et al.</i> (2009). .....	44
Figura 11 - Avanço da chama variando o fator de orientação da chama $\sigma_y$ . .....	45
Figura 12 - Resultados variando constante $g$ : (a) 1,3. (b) 1,5. (c) 1,7. (d) 2,0. (e) Experimento - DI SARLI <i>et al.</i> (2009). ....	47
Figura 13 - Avanço da chama variando a constante $g$ . ....	48
Figura 14 - Avanço da chama com relação a constante geral $K$ . .....	50
Figura 15 - Comparação entre resultados do STOKES e do FLACS <sup>®</sup> . (a) STOKES. (b) FLACS <sup>®</sup> . (c) Experimento - DI SARLI <i>et al.</i> (2009). .....	52
Figura 16 - Comparação do avanço da chama do STOKES e do FLACS <sup>®</sup> . .....	53

## ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1 – Configurações das simulações de explosão.....	29
Tabela 2 – Configurações das simulações de explosão buscando atrasar o avanço da chama.	48

## ABREVIATURAS

BML - Bray, Moss e Libby

CFD - *Computational Fluid Dynamics*

CFL - Número de Courant

DNS - *Numerical Direct Simulation*

EPA - *Environmental Protection Agency*

FLACS<sup>®</sup> - *Flame Accelaration Simulator*

FVM - *Finite Volume Method*

HSE - *Health and Safety Executive*

LES - *Large Eddy Simulation*

LFL - *Low Flammability Limity*

MIC - Isocianato de metila

OSHA - *Occupational Safety and Health Administration*

PDR - *Porosity Distributed Resistance*

RANS - *Reynolds Averaged Navier Stokes*

Re - Número de Reynolds

SF - *Smoth Factor*

SST - *Shear Stress Transport*

STOKES - *Shock Towards Kinetic Explosion Simulator*

UFL - *Upper Flammability Limity*

UFRJ - Universidade Federal do Rio de Janeiro

UNICAMP - Universidade Estadual de Campinas

## 1. INTRODUÇÃO

Todas as atividades desenvolvidas em uma planta industrial possuem de forma inerente um certo risco associado, não sendo possível eliminar por completo estes riscos. De forma geral, o risco pode ser definido como uma correlação entre a severidade de um determinado evento perigoso e a frequência de ocorrência deste, podendo ser subdividido em diferentes categorias, tais como: o risco à vida humana, ao meio ambiente, ao patrimônio e à imagem da empresa. Para se alcançar um modo de operação que possa ser considerado seguro, em uma planta industrial, ser capaz de quantificar e gerir as diferentes formas de riscos associados às suas atividades é extremamente importante (CHAKRABARTY *et al.*, 2015 e CROWL *et al.*, 2011).

Os três perigos químicos mais comuns associados às atividades de uma planta industrial são respectivamente: os incêndios, as explosões e as liberações de substâncias tóxicas. Dentre estes perigos químicos, as explosões, sobretudo as explosões de nuvem de vapor não confinadas, possuem o maior potencial para gerar vastas perdas econômicas caso ocorram. A alta severidade deste tipo de evento está diretamente interligada às características que as explosões possuem de liberar grandes quantidades de energia, afetando áreas consideravelmente grandes. A capacidade de quantificar o risco destes eventos está totalmente interligada à capacidade de modelar o fenômeno da explosão de gases inflamáveis com acurácia, auxiliando assim na manutenção de uma operação segura das plantas industriais (CROWL *et al.*, 2011).

Uma explosão pode ser definida como uma rápida expansão gasosa, resultando em uma onda de pressão que se move em alta velocidade, também chamada de onda de choque. Explosões podem ser originadas de duas formas distintas, sendo estas: a forma mecânica, como por exemplo em uma ruptura de vaso pressurizado; e por uma rápida reação exotérmica (CROWL *et al.*, 2011). As explosões originadas de rápidas reações exotérmicas possuem a característica de se propagarem rapidamente em direção aos reagentes, consumindo estes e gerando uma alta sobrepressão. A sobrepressão é a pressão resultante em objeto por conta do impacto com uma onda de choque, sendo a principal responsável pelos danos causados por uma explosão e, a depender do tamanho dos seus efeitos sobre a planta industrial e o seu redor, podem desencadear outros eventos catastróficos (CHAKRABARTY *et al.*, 2015 e CROWL *et al.*, 2011).

Uma das técnicas computacionais que vem sendo amplamente utilizada para se avaliar a consequência de explosões de gases inflamáveis é a Fluidodinâmica Computacional, em inglês *Computational Fluid Dynamics* (CFD), que, segundo MALALASEKERA *et al.* (2007), pode ser definida como a análise de sistemas envolvendo o escoamento de fluidos, transferência de calor e outros fenômenos ligados a estes, como por exemplo reações químicas, por meios de simulações computacionais. Dentre os métodos numéricos que podem ser empregados em CFD, o mais relevante para a modelagem de explosão é o Método dos Volumes Finitos, do inglês *Finite Volume Method* (FVM) (MALALASEKERA *et al.*, 2007 e MOUKALLED *et al.*, 2016).

A complexidade do fenômeno de explosão, que envolve uma grande quantidade de reações paralelas e uma cadeia complexa de espécies químicas intermediárias, que são formadas e consumidas durante a reação, torna impraticável a associação de equações de transporte extras para cada uma das espécies químicas deste fenômeno, pois, quanto maior o número de equações de transporte que devem ser resolvidas em uma simulação de CFD, maior será o custo computacional. A necessidade de modelar a reação de combustão de forma acurada, com um menor custo computacional, é a principal motivação da utilização de modelos de combustão (CANT *et al.*, 2008).

O modelo de combustão formulado por Bray, Moss e Libby (BML), para chamas pré-misturadas turbulentas, aplica o conceito de flemículas laminares, adicionando apenas uma equação de transporte extra para uma nova variável, denominada variável de progresso da reação ( $c$ ), para obter a taxa de reação. A variável de progresso da reação ( $c$ ) possui o valor de zero, para reagentes ainda não queimados, e o valor de um, para os produtos da reação de combustão, podendo ser correlacionada com a fração mássica de combustível presente nos reagentes e nos produtos. (CANT *et al.*, 2008).

O programa de CFD *Shock Towards Kinetic Explosion Simulator* (STOKES), desenvolvido na Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), é um exemplo de software que pode ser empregado em simulações de explosões. O STOKES é um software programado em FORTRAN, que resolve todas as equações de Navier Stokes para um escoamento reativo turbulento. No STOKES, a turbulência é modelada através da abordagem RANS, aplicando o modelo  $k$ - $\epsilon$ . O modelo de combustão utilizado é o modelo BML, baseado no conceito de flemículas. As equações de transporte e os

modelos são resolvidos aplicando uma malha computacional porosa, baseada nas diferenças de Minkowski, e avançando no tempo aplicando um algoritmo de Runge-Kutta de quarta ordem (FERREIRA *et al.*, 2019).

## 1.1. OBJETIVO

O presente trabalho tem como objetivo realizar uma simulação de explosão semiconfinada com obstáculos, utilizando o programa *Shock Towards Kinetic Explosion Simulator* (STOKES). O trabalho visa também avaliar a influência de dois grupos de parâmetros numéricos. O primeiro grupo é formado por parâmetros gerais de uma simulação de Fluidodinâmica Computacional (CFD), sendo estes: o número de Courant-Fredrichs-Lewy (CFL) e o *Smooth Factor* (SF). O segundo grupo de parâmetros são constantes do modelo de combustão de Bray, Moss e Libby (BML), sendo estas: a constante  $c_L$ , o fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$  e a constante  $g$ . Além disso, o trabalho visa também a comparar os resultados obtidos com o STOKES e os resultados obtidos utilizando o FLACS<sup>®</sup>, programa que é referência de mercado explosões de grandes escalas.

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1. SEGURANÇA DE PROCESSOS E AVALIAÇÃO DE RISCOS

Nas últimas décadas o campo da segurança de processos vem ganhando cada vez mais importância na indústria, com o objetivo principal de reduzir e controlar os perigos associados às operações das plantas industriais, através da implementação de diversas técnicas de avaliação e gestão de riscos. Esta projeção percebida do campo da segurança de processos foi motivada principalmente pela criação de grandes agências reguladoras, como a *Occupational Safety and Health Administration* (OSHA) e a *Environmental Protection Agency* (EPA), criadas nos Estados Unidos em 1970, e a *Health and Safety Executive* (HSE), criada no Reino Unido em 1974. Tais agências reguladoras, assim como outras análogas a estas, foram responsáveis por implementar medidas de segurança severas, principalmente após alguns dos acidentes de grandes proporções da indústria, como por exemplo: o Desastre de Flixborough (Reino Unido, 1974), o Desastre de Bhopal (Índia, 1984) e, mais recentemente, o Desastre de Buncefield (Reino Unido, 2005). O Desastre de Flixborough (Reino Unido, 1974) ocorreu na planta da Nypro Ltd, onde a ignição de uma nuvem inflamável de ciclohexano ocasionou a morte de 28 pessoas, deixou 36 pessoas feridas e afetou diversas estruturas ao redor. O Desastre de Bhopal (Índia, 1984), ocorreu em uma planta da Union Carbide, onde liberação acidental de gás tóxico isocianato de metila (MIC) ocasionou a morte de 2.000 pessoas e causou danos à saúde de mais de 20.000 pessoas. O Desastre de Buncefield (Reino Unido, 2005), ocorreu no depósito de petróleo de Buncefield, onde a vaporização de gasolina líquida, descarregada de forma inesperada, gerou uma nuvem inflamável, ocasionando uma explosão de grandes proporções, seguida de um incêndio, ferindo mais de 40 pessoas e ocasionando danos a propriedades em um raio de 10 km. (CHAKRABARTY *et al.*, 2015 e CROWL *et al.*, 2011).

Como não é possível eliminar totalmente o risco na indústria, todo processo industrial possui um certo risco associado às suas atividades. O risco pode ser definido como uma relação entre a severidade de um evento perigoso e a frequência de ocorrência deste. Este risco pode ser categorizado de diferentes formas, das quais podemos citar: o risco à vida humana, ao meio ambiente, ao patrimônio e à imagem da empresa. Avanços recentes em tecnologia vêm tornando possível a implementação de

processos cada vez mais complexos na indústria, sendo caracterizados por operarem, por exemplo, a pressões mais altas e com espécies químicas mais reativas. Este aumento de complexidade, juntamente com a sofisticação das instalações de processos e sistemas de controle, deve ser acompanhado de avanços também nas tecnologias aplicadas à segurança de processos, caso contrário, a segurança das operações pode ser comprometida. Ser capaz de quantificar e gerir as diferentes formas de riscos associados à atividade de uma planta industrial é de extrema importância para garantir uma operação segura (CHAKRABARTY *et al.*, 2015 e CROWL *et al.*, 2011).

Ao avaliarmos as formas de perigo existentes em uma planta industrial, podemos perceber que tais perigos podem ser classificados em dois grupos distintos: os perigos mecânicos, que incluem danos causados aos funcionários por caírem, tropeçarem ou moverem algum objeto; e os perigos químicos, dois quais os três mais comuns são respectivamente os incêndios, as explosões e as liberações de substâncias tóxicas. Dentre os perigos químicos apresentados, a explosão é o que apresenta maior potencial para gerar perdas econômicas, principalmente se esta se tratar da explosão de uma nuvem de vapor não confinada, onde uma grande quantidade de substâncias químicas voláteis e inflamáveis são liberadas, se dispersando no ar através da planta industrial, e em seguida entram em contato com uma fonte de ignição, gerando assim a explosão. Explosões de nuvem de vapor não confinadas possuem alta severidade, pois este tipo de evento envolve normalmente a liberação de grandes quantidades de gás e afetam vastas áreas. Para quantificar o risco deste tipo de evento são necessários estudos de análise de risco e segurança de processos, que por sua vez são totalmente dependentes da capacidade de modelar o fenômeno da explosão de gases inflamáveis com acurácia (CROWL *et al.*, 2011).

## **2.2. INCÊNDIOS E EXPLOSÕES**

Incêndios e explosões podem ser distinguidos pela taxa com que a energia da reação de combustão é liberada, sendo caracterizados por possuírem uma taxa de liberação de energia mais lenta em incêndios e mais rápida em explosões. Um incêndio pode ser definido como uma reação em espécies químicas que reagem com um oxidante, gerando uma liberação de energia; já uma explosão pode ser definida como uma rápida expansão



gasosa, resultando em uma onda de pressão que se move em alta velocidade, também chamada de onda de choque, podendo ser originada de forma mecânica, por exemplo, por conta de uma ruptura de um vaso, ou ser originada de uma rápida reação exotérmica. Apesar de se tratarem de fenômenos distintos, incêndios e explosões podem ser intimamente correlacionados, com a ocorrência de um podendo resultar no início do outro (CROWL *et al.*, 2011). A principal diferença entre a geração de um evento de incêndio e uma explosão está ligada ao grau de mistura do combustível com o oxigênio presente no ar antes da ignição. Quando a ignição é retardada e o combustível vazado possui tempo suficiente para gerar um certo grau de mistura com oxigênio, formando uma nuvem inflamável pré-misturada, a reação de combustão irá gerar uma explosão; porém, no caso de uma ignição instantânea, essa pré-mistura não é formada antes da ignição e a reação de combustão gerará um incêndio (CHAKRABARTY *et al.*, 2015).

Para que a ignição ocorra é necessário que a nuvem gasosa esteja dentro de um certo intervalo de concentrações, chamado de limite de inflamabilidade, que é diferente para cada combustível avaliado. Em concentrações abaixo do Limite Inferior de Inflamabilidade, em inglês *Low Flammability Limity* (LFL), a concentração de combustível está muito diluída, impossibilitando a reação de combustão; já acima do Limite Superior de Inflamabilidade, em inglês *Upper Flammability Limity* (UFL), o componente que está em baixa concentração é o oxigênio, também impossibilitando a reação de combustão (CHAKRABARTY *et al.*, 2015 e CROWL *et al.*, 2011).

Explosões possuem a característica de se propagarem rapidamente em direção aos reagentes, consumindo estes e gerando uma alta sobrepressão, que é a pressão resultante em objeto por conta do impacto com uma onda de choque. A sobrepressão é a principal responsável pelos danos causados por uma explosão e, a depender do tamanho dos seus efeitos sobre as demais barreiras de prevenção e mitigação de riscos, em uma planta industrial, podem desencadear outros eventos catastróficos. Dependendo da velocidade com que a chama de uma explosão se propaga, esta pode ser definida como uma deflagração ou uma detonação. Deflagração é uma explosão em que a velocidade de propagação da chama é menor que a velocidade em que o som se propaga (344 m/s para gases ideais a 20 °C); já a detonação ocorre quando a velocidade de propagação da chama é maior que velocidade do som (CHAKRABARTY *et al.*, 2015 e CROWL *et al.*, 2011).

Em uma deflagração, o mecanismo que faz com que os reagentes ainda não queimados entrem em combustão é a transferência de energia da chama para os reagentes, que se dá através da condução de calor e difusão molecular, sendo estes fenômenos relativamente lentos; esta transferência de energia faz com que os reagentes ultrapassem a energia de ativação da reação de combustão, continuando assim a explosão gerando uma onda de choque com uma pressão máxima que fica entre 1 atm e 2 atm, tendo uma duração normal da ordem de milissegundos. Já em uma detonação, a frente a chama se propaga por meio de uma forte onda de pressão, que gera a compressão dos reagentes a sua frente, levando estes a uma temperatura acima da de autoignição, que é a temperatura acima da qual o meio é capaz de ignitar sem necessidade de uma fonte de energia externa, mantendo assim a reação de combustão e gerando uma onda de choque com uma pressão máxima que pode passar de 10 atm, durando normalmente menos que 1 ms. Apesar de uma deflagração poder se tornar uma detonação, dependendo das características do evento, deflagrações ocorrerem mais comumente nas plantas e indústrias (CHAKRABARTY *et al.*, 2015 e CROWL *et al.*, 2011).

### 2.3. MODELAGEM MATEMÁTICA

A modelagem matemática de um fenômeno físico como a explosão, que envolve escoamento de fluidos, transferência de calor e massa, tem início nas leis de conservação de propriedades físicas, que são representadas pelas seguintes equações: Equação da Continuidade (Equação 1), que representa a conservação de massa; as Equações de Navier-Stokes (Equação 2), que representam a conservação de momento nas três direções espaciais; a equação de conservação de energia (Equação 3) e a equação de conservação de espécie química (Equação 4). As equações citadas acima são obtidas aplicando-se a hipótese do contínuo, que assume que, a partir de um número adequadamente elevado de moléculas, o comportamento do fluido pode ser descrito como dependente apenas das variáveis macroscópicas do problema, podendo-se ignorar a estrutura molecular da matéria e os movimentos moleculares (MALALASEKERA *et al.*, 2007 e MOUKALLED *et al.*, 2016). Tais equações são apresentadas abaixo para um fluido compressível, seguindo a notação indicial, também chamada notação de Einstein, onde os índices  $i$  e  $j$  podem assumir os valores 1, 2 e 3, correspondendo respectivamente

à cada uma das três direções espaciais (x, y, z); sendo convencionado também que, se um dos termos da equação apresentar uma repetição de um dos índices, este termo representa um somatório nas três direções espaciais (PATANKAR, 1980).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho U_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j U_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial P}{\partial x_i} + \rho g_i + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j E)}{\partial x_j} = - \frac{\partial(U_j P)}{\partial x_j} + \frac{\partial(U_i \tau_{ij})}{\partial x_j} - \frac{\partial Q_j}{\partial x_j} \quad (3)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j Y_\alpha)}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) + \omega_\alpha \quad (4)$$

em que  $\rho$  corresponde à densidade,  $U_i$ , à componente da velocidade em cada uma das três direções espaciais,  $t$ , ao tempo,  $x_i$ , às três coordenadas espaciais,  $P$ , à pressão,  $g_i$ , à gravidade em cada uma das coordenadas espaciais,  $E$ , à energia total,  $Q_i$ , ao fluxo de calor trocado nas três direções espaciais,  $Y_\alpha$ , à fração molar da espécie química  $\alpha$  e  $\omega_\alpha$ , à taxa de geração da espécie química  $\alpha$  (MALALASEKERA *et al.*, 2007 e MOUKALLED *et al.*, 2016). O termo  $\tau_{ij}$ , que aparece na equação de Navier-Stokes (Equação 2) e na equação de conservação de energia (Equação 3), é chamado de Tensor Tensão e representa os nove componentes viscosos da tensão sobre um elemento fluido; os índices  $i$  e  $j$  indicam que uma superfície normal à direção  $i$  sofre o efeito da tensão viscosa aplicada na direção  $j$ . Utilizando a Lei da Viscosidade de Newton, o Tensor Tensão pode ser descrito como:

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (5)$$

em que  $\mu$  representa a viscosidade dinâmica do fluido e  $\delta_{ij}$  possui o nome de delta de Kronecker, recebendo o valor de 1, caso os índices  $i$  e  $j$  possuam o mesmo valor, e 0, caso possuam valores diferentes (MALALASEKERA *et al.*, 2007 e MOUKALLED *et al.*, 2016).

Ao se analisar as equações de conservação apresentadas anteriormente (Equação 1 à Equação 4) é possível perceber que existe uma semelhança entre os termos das equações, indicando que estas obedecem um princípio de conservação geral. Tomando uma variável genérica  $\phi$ , podemos então descrever este princípio de conservação através da seguinte equação:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S \quad (6)$$

em que  $\Gamma$  representa o coeficiente de difusão da variável  $\phi$  e  $S$  é o seu termo fonte. Seguindo a ordem em que são apresentados, os termos da Equação 6 são respectivamente: o termo transiente, que representa a taxa com que a propriedade  $\phi$  varia no volume de controle, com relação ao tempo; o termo convectivo, que representa a taxa líquida do fluxo de  $\phi$  por conta do escoamento do fluido; o termo difusivo, que representa a taxa líquida de transporte difusivo molecular de  $\phi$  através do volume de controle; e o termo fonte, que é a taxa com que  $\phi$  é gerado ou consumido dentro do volume de controle (MALALASEKERA *et al.*, 2007 e PATANKAR, 1980).

#### 2.4. FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL E MÉTODOS DO VOLUMES FINITOS

Apesar de bastante conhecidas, as equações apresentadas acima não possuem resolução analítica geral, principalmente quando se trata de problemas complexos de engenharia e, para resolvê-las, é necessária a utilização de métodos numéricos, como por exemplo a Fluidodinâmica Computacional. Segundo MALALASEKERA *et al.* (2007), Fluidodinâmica Computacional, em inglês *Computational Fluid Dynamics* (CFD), é definida como a análise de sistemas envolvendo o escoamento de fluidos, transferência de calor e outros fenômenos ligados a estes, como por exemplo reações químicas, por meios de simulações computacionais. Como explosões são fenômenos que envolvem todos os aspectos citados acima, a Fluidodinâmica Computacional pode ser empregada para se obter informações acuradas sobre estes fenômenos, sendo amplamente utilizada para se avaliar a consequência deste tipo de evento. Os métodos numéricos podem ser divididos em três grupos, a depender da técnica utilizada para se obter suas soluções, sendo estes: diferenças finitas, elementos finitos e volumes finitos. Destes três, o mais relevante para a modelagem de explosão, e para a Fluidodinâmica Computacional em geral, é o Método dos Volumes Finitos, do inglês *Finite Volume Method* (FVM) (MALALASEKERA *et al.*, 2007 e MOUKALLED *et al.*, 2016).

Em resumo, o Método dos Volumes Finitos é um método numérico de diferenças finitas, em que as equações diferenciais parciais que representam as leis de conservação, que, a princípio, são válidas em um volume diferencial, são integradas em relação a

todos os volumes de controle finitos do domínio computacional, sendo em seguida discretizadas em equações algébricas, aplicadas a volumes finitos, gerando um sistema de equações algébricas, que deve ser então solucionado através de um método iterativo (MOUKALLED *et al.*, 2016 e MALALASEKERA *et al.*, 2007). Para problemas transientes, onde as propriedades do escoamento variam com o tempo, é necessário realizar a discretização tanto espacial, quanto temporal do problema, gerando assim uma matriz de variáveis que deve ser resolvida. Após a discretização espacial e temporal, se estrutura um sistema de correlações algébricas entre as células vizinhas do domínio e são as diferentes formas de estruturar estas correlações que caracterizam os esquemas de resolução numérica (HIRSCH *et al.*, 2007). A utilização de equações algébricas, ao invés das equações diferenciais originais, torna a resolução dos problemas complexos de engenharia muito mais simples, sendo esta simplificação inerente o que impulsiona a ampla utilização do CFD, tanto na indústria, quanto na academia (PATANKAR, 1980).

## 2.5. CARACTERÍSTICAS DOS ESQUEMAS NUMÉRICOS

Uma das principais propriedades que as equações discretizadas devem possuir é a acurácia, que é uma medida do quanto a solução numérica está próxima da solução exata do problema. Porém, para a maior parte dos problemas mais complexos de engenharia, a solução exata do problema não está disponível para comparação, sendo a acurácia então medida através do erro de truncamento. Tomando como exemplo uma função  $u(x)$ , temos que sua derivada pode ser definida como:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} \quad (7)$$

Como, nas equações discretizadas,  $\Delta x$ , mesmo sendo pequeno, possui um valor finito, um erro é introduzido ao sistema, sendo este chamado de erro de truncamento. O erro de truncamento vai a zero, quando  $\Delta x$  tende a zero, e a potência de  $\Delta x$  com a qual este erro decai é chamada de ordem de acurácia. Por exemplo, um esquema numérico com segunda ordem terá o seu erro de truncamento diminuído em quatro vezes, caso o valor de  $\Delta x$  seja dividido por dois. Vale ressaltar que a ordem de acurácia não representa o valor do erro em cada célula do domínio e sim o quão rápido este erro decai com o refinamento da discretização (HIRSCH *et al.*, 2007 e MOUKALLED *et al.*, 2016).

Além da acurácia, três critérios principais devem ser satisfeitos, ao se avaliar as correlações entre o modelo matemático analítico, o esquema numérico e suas respectivas soluções, sendo estes: a consistência, a estabilidade e a convergência. Um esquema numérico é considerado consistente, quando este tem a propriedade de tender às equações diferenciais quando o passo de tempo e a discretização espacial tendem a zero; é considerado um esquema estável, quando o erro da simulação permanece limitado com o avanço dos passos de tempo, ou seja, quando o número de passos de tempo tende a infinito, o erro não pode tender a infinito; e a condição de convergência diz que a solução de um esquema numérico deve tender ao valor da solução exata, quando o passo de tempo e a discretização espacial tendem a zero. Os três critérios descritos acima são correlacionados entre si e o Teorema da Equivalência de Lax diz que: para um problema de valor inicial bem-posto e um método de discretização consistente, a estabilidade é a condição necessária e suficiente para a convergência (HIRSCH *et al.*, 2007).

A depender da forma como o problema transiente é resolvido, podemos caracterizar dois tipos principais de métodos, sendo estes: os métodos explícitos e os métodos implícitos. Em métodos explícitos, ao se calcular o valor das variáveis em um novo passo de tempo, é necessário conhecer apenas os valores das variáveis no passo de tempo anterior, o que faz com que o problema possa ser resolvido com um número mínimo de operações aritméticas, gerando assim um esforço computacional mínimo por iteração; já em métodos implícitos, além de depender dos valores das variáveis no passo de tempo anterior, as variáveis do passo de tempo atual são também dependentes das demais variáveis do próprio passo de tempo atual, o que acaba gerando um problema algébrico, em que a matriz discretizada deve ser resolvida para cada iteração, o que demanda um maior esforço computacional por passo de tempo. Apesar de exigirem um menor esforço computacional por passo de tempo, métodos explícitos possuem critérios de estabilidade e convergência, que impõem restrições severas ao valor do passo de tempo, ou seja, o quanto a simulação avança em cada iteração; muitos métodos implícitos são caracterizados por não possuírem este tipo de restrição, o que faz com que estes necessitem de um número menor de iterações na simulação (MALALASEKERA *et al.*, 2007 e HIRSCH *et al.*, 2007).

Um esquema numérico pode ser condicionalmente estável, incondicionalmente estável ou incondicionalmente instável. Métodos implícitos são conhecidos por

geralmente serem incondicionalmente estáveis, enquanto métodos explícitos são, no melhor dos casos, condicionalmente estáveis. Uma das condições fundamentais de estabilidade imposta a alguns métodos explícitos está ligada à faixa de valores aceitáveis para o Número de Courant ou Número de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), que é apresentado na Equação 8:

$$CFL = U \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq CFL_{max} \quad (8)$$

Esta condição de estabilidade impõe que a distância coberta por perturbações, que se propagam a uma velocidade  $U$ , seja menor que a distância a mínima entre dois pontos da malha, para um intervalo de tempo  $\Delta t$  (HIRSCH *et al.*, 2007).

Na modelagem de fenômenos que envolvem a convecção, um dos desafios é calcular o valor da variável de transporte na face da célula e a forma de calcular estas propriedades também é uma das principais diferenças entre os esquemas de resolução numérico. Por exemplo: nos esquemas de diferenças centrais, o valor da propriedade na face da célula é calculado através de uma interpolação linear entre os valores das propriedades no centro das células vizinhas; nos esquemas denominados *Upwind* a direção do escoamento é levada em consideração ao se calcular a propriedade na face, sendo este igual ao valor da propriedade no centro da célula a jusante, na direção do escoamento (MALALASEKERA *et al.*, 2007 e HIRSCH *et al.*, 2007).

## 2.6. MODELAGEM DA TURBULÊNCIA

O escoamento de um fluido pode ser classificado como laminar e turbulento, a depender do número de Reynolds ( $Re$ ). O número de Reynolds é um número adimensional que representa a razão entre as forças inerciais de um escoamento, associadas aos efeitos convectivos, e suas forças viscosas, sendo este apresentado a seguir (MALALASEKERA *et al.*, 2007):

$$Re = \frac{UL}{\nu} \quad (9)$$

em que  $U$  é a velocidade característica do escoamento médio,  $L$  a escala de comprimento característica do escoamento médio e  $\nu$  é a viscosidade cinemática do fluido. A partir de certo valor do número de Reynolds, o escoamento do fluido passa a

possuir um comportamento caótico, randômico e irregular, caracterizando assim um escoamento turbulento. Este tipo de escoamento está presente na maioria das aplicações de engenharia e possuem também a característica de serem difusivos, o que proporciona uma maior transferência das propriedades de transporte (MALALASEKERA *et al.*, 2007).

Uma parte importante da resolução numérica dos problemas de CFD é definir qual escala de turbulência será resolvida diretamente através das equações de transporte e qual será modelada. Na Simulação Numérica Direta, em inglês *Direct Numerical Simulation* (DNS), todas as escalas de turbulência são resolvidas numericamente, através das equações da Continuidade e Navier-Stokes, porém para ser aplicada é necessário um nível de refinamento da malha muito alto, o que impossibilita a sua aplicação atualmente em escoamentos mais complexos e sua utilização na indústria, dado o custo computacional associado. A abordagem mais utilizada na indústria, principalmente por seu menor esforço e tempo computacional, é a abordagem RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*), em que apenas as variáveis médias do escoamento são calculadas numericamente e todas as oscilações associadas a turbulência são modeladas através dos modelos de turbulência. Uma opção que apresenta custo computacional e acurácia intermediários às duas abordagens anteriores é a Simulação dos Grandes Turbilhões, em inglês *Large Eddy Simulation* (LES). Neste caso, as grandes escalas de turbulência são resolvidas numericamente, através das equações de transporte, e as menores escalas são modeladas, podendo chegar a resultados tão acurados quanto os de DNS, exigindo um esforço computacional menor que esta abordagem, porém ainda muito superior ao exigido pela abordagem RANS, o que ainda impossibilita sua utilização em problemas mais complexos e na indústria. Além das abordagens citadas acima, existem outras, que também variam na escolha de quais escalas de turbulência serão resolvidas numericamente e quais serão modeladas, porém, por ser a abordagem mais difundida e utilizada em problemas de engenharia, tanto na academia quanto na indústria, seguiremos nossa discussão focando na abordagem RANS (MALALASEKERA *et al.*, 2007).

Na abordagem RANS, há a aplicação de uma média temporal sobre as equações de transporte, o que faz com que o escoamento turbulento, que é intrinsecamente transiente, possa ser separado em uma variável média e uma variável flutuante, cuja média temporal, por definição, é igual a zero. Após a aplicação da média temporal, a equação



da Continuidade permanece a mesma, porém para propriedades médias; já as equações de Navier-Stokes acabam sendo substituídas pelas equações RANS. A equação média-temporal da Continuidade e as equações RANS estão apresentadas para um escoamento incompressível nas Equações 10 e 11 respectivamente, onde a barra sobre a variável representa a média temporal desta variável.

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (10)$$

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \nu \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \overline{u_i u_j} \right) \quad (11)$$

O termo  $\rho(\overline{u_i u_j})$ , que na Equação 11 aparece já dividido pela densidade, é conhecido como Tensor de Reynolds. Apesar de, por definição, a média temporal de uma variável flutuante ser zero, o Tensor de Reynolds representa a média temporal de um produto de duas flutuações, o que não possui uma resolução direta. O Tensor de Reynolds, que é um tensor simétrico, é responsável por adicionar mais seis incógnitas ao sistema, gerando um problema de fechamento. A necessidade de modelar esses seis termos turbulentos, para resolver o problema de fechamento, é o que dá origem aos modelos de turbulência (MALALASEKERA *et al.*, 2007).

Visando resolver o Tensor de Reynolds, Joseph Valentin Boussinesq sugeriu uma correlação análoga a Lei da Viscosidade de Newton (Equação 12), criando assim o conceito de viscosidade turbulenta  $\mu_t$  ou viscosidade turbulenta cinemática  $\nu_t$ .

$$\overline{u_i u_j} = \frac{2}{3} k \delta_{ij} - \nu_t \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (12)$$

Por serem linearmente dependentes do tensor de deformação, os modelos baseados no conceito de Boussinesq são chamados de modelos turbulentos lineares. Apesar de ainda não conhecermos o valor da viscosidade turbulenta, a principal vantagem do conceito de Boussinesq é que conseguimos especificar todos os seis componentes do Tensor de Reynolds, se formos capazes de modelar apenas a viscosidade turbulenta. Os modelos de turbulência baseados no conceito de Boussinesq buscam então especificar o valor da viscosidade turbulenta e podem ser classificados de acordo com o número de equações de transporte extra que estes utilizam para calcular esta variável (MALALASEKERA *et al.*, 2007).

O modelo de turbulência mais amplamente difundido, tanto na academia quanto na indústria, é o modelo  $k$ - $\varepsilon$ , que é um modelo de duas equações. Assim, para especificar o valor da viscosidade turbulenta, este modelo adiciona duas equações de transporte extras, sendo uma para modelar a energia cinética turbulenta  $k$ , Equação 13, e outra para a taxa de dissipação viscosa da energia cinética turbulenta  $\varepsilon$ , Equação 14. A viscosidade cinemática turbulenta é então modelada de acordo com a Equação 15.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = P_k - \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (13)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + U_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = c_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - c_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \quad (14)$$

$$\nu_t = C \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (15)$$

O modelo  $k$ - $\varepsilon$  é conhecido por se adequar muito bem a escoamentos cisalhantes, em que as derivadas mais relevantes para o problema são as que se aplicam à direção perpendicular ao escoamento, porém ele possui a característica de não se adequar muito bem às regiões próximas à parede de um escoamento. Além do modelo  $k$ - $\varepsilon$ , podemos citar outros modelos de turbulência, como: o modelo  $k$ - $\omega$ , o *Reynolds Stress Equation Model* (RSM) e o *Shear Stress Transport* (SST) (MALALASEKERA *et al.*, 2007).

## 2.7. CONCEITO DE POROSIDADE

Em uma simulação de CFD, a região próxima à parede, onde a camada limite deve ser resolvida, é a região que exige um maior esforço computacional, dado que nesta região, que possui um gradiente de velocidade muito alto, a malha normalmente deve estar mais refinada que o necessário para o restante do domínio. Visando superar o problema da resolução do escoamento no entorno das menores escalas da geometria, foi desenvolvido o conceito de Resistência Porosa Distribuída, em inglês *Porosity Distributed Resistance* (PDR), que atribui uma certa porosidade volumétrica para cada célula do domínio computacional ( $\beta_v$ ) e uma porosidade superficial para cada face da célula ( $\beta_x$ ,  $\beta_y$  e  $\beta_z$ ), com apresentado abaixo:

$$\beta_v = \frac{V_f}{V_f + V_s} = \frac{V_f}{\delta x \delta y \delta z} \quad (16)$$

$$\beta_x = \frac{\int_A dydz}{\delta y \delta z}; \beta_y = \frac{\int_A dx dz}{\delta x \delta z}; \beta_z = \frac{\int_A dx dy}{\delta x \delta z} \quad (17)$$

em que  $V_f$  corresponde ao volume ocupado por fluido na célula;  $V_s$  ao volume obstruído por sólidos na célula;  $\delta x$ ,  $\delta y$  e  $\delta z$  são as dimensões da célula computacional; e  $A$  corresponde a área de cada face da célula. Para células totalmente obstruídas são atribuídos valores de porosidades volumétricas e superficiais iguais a zero, enquanto células sem nenhuma obstrução possuem porosidades volumétricas e superficiais iguais a um, indicando que a célula está totalmente aberta para o escoamento (FERREIRA *et al.*, 2019).

Células com porosidade diferente de um são responsáveis por gerar resistência ao movimento do fluido e atuam também aumentando a produção de turbulência. Tais características das células com obstrução geram a necessidade de modificações nas equações de conservação de massa (Equação 1) e momento (Equação 2), sendo tais modificações apresentadas nas Equação 18 e Equação 19.

$$\frac{\partial(\beta_v \rho)}{\partial t} + \frac{\partial(\beta_i \rho U_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (18)$$

$$\frac{\partial(\beta_v \rho U_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\beta_j \rho U_j U_i)}{\partial x_j} = \beta_v \frac{\partial P}{\partial x_i} + \beta_v \rho g_i + \frac{\partial(\beta_j \tau_{ij})}{\partial x_j} + R_i \quad (19)$$

em que  $R_i$  corresponde à resistência ao movimento adicional, causada pelos obstáculos, e deve ser modelado ao se aplicar o conceito de porosidade. A utilização do conceito de porosidade permite a utilização de uma malha mais grosseira, sendo bastante aplicado em simulações de explosão, pois o domínio computacional envolvido nesse tipo de simulação na indústria é normalmente muito extenso e calcular as camadas limite de todo este domínio impossibilitaria este tipo de análise (FERREIRA *et al.*, 2019 e VIANNA *et al.*, 2010).

## 2.8. MÉDIA DE FAVRE

Ao se trabalhar com fluidos compressíveis, uma opção interessante é, ao invés de utilizar a média de Reynolds tradicional, usar uma abordagem em que as variáveis de interesse são ponderadas pela densidade, antes da aplicação da média temporal, a

chamada média de Favre, apresentada na Equação 20, juntamente com a definição de sua flutuação, Equação 21.

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} \quad (20)$$

$$\phi'' = \phi - \tilde{\phi} \quad (21)$$

A barra superior presente na equação acima representa a média temporal de Reynolds. A principal vantagem da utilização da média de Favre é sua propriedade de suprimir termos dependentes da flutuação da densidade, tornando suas equações mais simples do que as geradas utilizando a média de Reynolds tradicional (MALALASEKERA *et al.*, 2007 e CANT *et al.*, 2008).

Ao se aplicar a média de Favre à equação da continuidade, às equações de conservação de momento, conservação de energia e conservação de espécie química, obtemos as seguintes equações (MALALASEKERA *et al.*, 2007, GATSKI *et al.*, 2009 e CANT *et al.*, 2008):

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (22)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}) \quad (23)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{E})}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{u}_j\bar{\rho}\tilde{H})}{\partial x_j} = \frac{\partial(\bar{u}_i\bar{\tau}_{ij})}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{q}_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{Q}_j}{\partial x_j} \quad (24)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_\alpha)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{\rho u_j'' Y_\alpha''}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{\rho D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j}} \right) + \bar{\omega}_\alpha \quad (25)$$

em que H corresponde à entalpia,  $q_j$  ao vetor fluxo de calor e  $Q_j$  ao fluxo turbulento de calor. Ao se analisar a média de Favre da equação de conservação de espécie química, Equação 25, podemos perceber que os três termos da direita acrescentam novas incógnitas ao problema, gerando a necessidade de modelagem desses termos. O primeiro termo é o responsável por descrever o transporte turbulento da espécie  $\alpha$ , onde a propriedade  $\overline{\rho u_j'' Y_\alpha''}$  é conhecida como fluxo de Reynolds da fração mássica da espécie  $\alpha$ , sendo normalmente modelado em analogia a Lei de Fick:

$$\overline{\rho u_j'' Y_\alpha''} = -\Gamma_\alpha \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j} \quad (26)$$

O segundo termo do lado direito da Equação 25 representa a média do transporte molecular da espécie  $\alpha$  e, como em escoamentos altamente turbulentos os efeitos do

transporte molecular podem ser normalmente desprezados, este termo é geralmente omitido, ao se assumir que o escoamento possui alto número de Reynolds. O terceiro termo representa a taxa média de produção turbulenta de fração mássica da espécie  $\alpha$ , sendo caracterizado por englobar de forma conjunta efeitos químicos, de transporte molecular e de turbulência, o que faz sua modelagem ser considerada difícil, principalmente ao se modelar a combustão em uma chama pré misturada, onde todos esses efeitos geralmente são extremamente acoplados (CANT *et al.*, 2008).

## 2.9. CHAMA PRÉ-MISTURADA E MODELAGEM DA COMBUSTÃO

Uma chama pré-misturada ocorre quando o combustível e o comburente são misturados anteriormente à ignição, gerando assim, após a ignição dos reagentes, uma explosão, que tem como uma das principais características a propagação da chama na direção dos reagentes. A depender do regime de escoamento do fluido, as chamas pré-misturadas podem ser caracterizadas como laminares ou turbulentas (CANT *et al.*, 2008).

A estrutura de uma chama pré-misturada laminar pode ser dividida em três zonas principais: a zona de pré-aquecimento, formada principalmente por reagentes, com temperatura abaixo das duas outras regiões, o que gera um fluxo de calor em direção à zona de pré-aquecimento, porém não suficiente para superar a energia de ativação da reação de combustão; a zona de reação, que é a região mais fina dentre as três regiões e onde as reações de combustão ocorrem, devido a diversas reações paralelas ocorrendo simultaneamente, acarretando a formação de uma cadeia complexa de espécies intermediárias; e, por fim, a zona de equilíbrio, que possui a temperatura mais alta entre as três e é caracterizada por atingir o estado em que a taxa de formação e dissociação dos produtos principais se balanceiam (CANT *et al.*, 2008).

A turbulência sobre uma chama inicialmente laminar pode gerar tanto o aumento quanto a diminuição da taxa de propagação desta. Um dos efeitos que aumenta a propagação é o enrugamento da chama, gerada pelos vórtices característicos dos regimes turbulentos, que proporciona um aumento da área superficial da chama, contribuindo para uma propagação mais acelerada. Porém, os mesmos vórtices que podem aumentar a área superficial da chama, também podem acabar abalando

localmente a estrutura interna destas, causando um descompasso entre as reações químicas e a difusão, o que pode diminuir a taxa com que a combustão ocorre e assim diminuir a propagação da chama. Assim como nos escoamentos de fluidos, as principais aplicações industriais do fenômeno da combustão pré-misturada, em estudos de câmaras de combustão e aplicações em segurança de processos, envolvem chamas com características turbulentas (CANT *et al.*, 2008).

Ao se tentar modelar a taxa de reação de uma combustão, é possível concluir que a quantidade de reações paralelas e a cadeia complexa de espécies químicas intermediárias formadas e consumidas durante a reação torna computacionalmente impraticável a associação de equações de transporte extras para cada uma das espécies químicas associadas a este fenômeno, pois quanto maior o número de equações de transporte que devem ser resolvidas em uma simulação de CFD, maior será o custo computacional. Sendo assim, os modelos combustão surgem da necessidade de modelar a reação de combustão de forma acurada, com um menor custo computacional (CANT *et al.*, 2008).

Modelos de combustão aplicados a chamas pré-misturadas turbulentas, que utilizam o conceito de flemículas laminares, baseiam-se na observação de que, em chamas que não são intensamente distorcidas pela turbulência, a estrutura local da chama turbulenta é essencialmente a mesma de uma chama laminar. Assume-se então que a chama turbulenta seja formada por várias flemículas, que são finas interfaces separando os produtos dos reagentes, onde a reação de combustão ocorre propriamente e que se propagam na direção dos reagentes, assim como chamas laminares. Apesar da intensa ligação entre a reação química e os fenômenos de transporte em uma chama, o conceito de flemículas laminares proporciona a possibilidade de se avaliar de forma independente o fenômeno químico e a turbulência, em uma chama pré-misturada turbulenta (CANT *et al.*, 2008).

O modelo de combustão formulado por Bray, Moss e Libby (BML), para chamas pré-misturadas turbulentas, aplica o conceito de flemículas laminares e adiciona apenas uma equação de transporte extra ao problema, para assim obter a taxa de reação. A equação de transporte extra é aplicada a uma nova variável, denominada variável de progresso da reação,  $c$ , que possui o valor de zero, para reagentes ainda não queimados, e o valor de um, para os produtos da reação de combustão. A variável de progresso da

reação pode ser correlacionada com a fração mássica de combustível presente nos reagentes e nos produtos pela Equação 27, apresentada abaixo:

$$c = \frac{Y_F - Y_{FR}}{Y_{FP} - Y_{FR}} \quad (27)$$

em que  $Y_F$  é a fração mássica de combustível instantânea,  $Y_{FR}$  é a fração mássica de combustível nos reagentes ainda não queimados e  $Y_{FP}$  é a fração mássica de combustível no produto da queima (CANT *et al.*, 2008).

Através da abordagem do modelo BML, apenas uma equação de transporte extra se faz necessária para a resolução do problema, sendo esta responsável por modelar o transporte da variável de progresso. A equação de transporte para  $c$ , considerando a média de Favre, é apresentada na Equação 28:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{c}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_l + \mu_t}{\sigma_c} \right) \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j} \right] + \bar{\omega} \quad (28)$$

em que  $u$  é a velocidade,  $\mu_l$  e  $\mu_t$  são a viscosidade laminar e turbulenta respectivamente,  $\sigma_c$  é o número de Schimidt e  $\bar{\omega}$  é a taxa média de criação de produtos da combustão por unidade de volume. A barra representa a média de Reynolds e o til representa a média de Favre (BIRKBY *et al.*, 1999).

O modelo Bray-Moss-Libby faz uso de uma função de densidade de probabilidade, para descrever o comportamento da variável de progresso da reação. O conceito em que a utilização da função de densidade de probabilidade se baseia está associado a uma chama pré-misturada, passando por uma sonda instalada em um ponto fixo do espaço. Como o conceito de flemículas laminares assume que a chama é uma interface fina, a sonda detectaria na maior parte do tempo reagentes ou produtos, sendo capaz de detectar os gases reagindo apenas nos momentos em que a chama atravessasse a localização da sonda. Como é assumindo que os gases em combustão contribuem pouco para a função de densidade de probabilidade, a formulação do modelo BML não pode ser aplicada para avaliar a taxa de reação turbulenta média, gerando assim a necessidade da formulação de um modelo para a taxa da reação ( $\bar{\omega}$ ) (CANT *et al.*, 2008).

A abordagem espacial para o modelo da taxa média de criação de produtos da combustão por unidade de volume ( $\bar{\omega}$ ) proposto por Bray-Moss-Libby é apresentado na Equação 29:

$$\bar{\omega} = v_y \omega_y \quad (29)$$

A Equação 29 baseia-se na formulação de uma onda quadrada, que correlaciona a variável de progresso da reação com a distância coberta pela chama. Esta onda quadrada é obtida ao se sobrepor o contorno instantâneo da variável de progresso, aplicando uma técnica de imagens bidimensionais, em um contorno médio de  $c$ , obtido através da média de várias imagens nas mesmas condições. A variável  $v_y$  representa a frequência de cruzamento média com que o contorno médio de  $c$  é atravessado pela chama instantânea (número de cruzamentos por unidade de comprimento) e  $\omega_y$  corresponde a taxa média de reação por cruzamento. Baseada na onda quadrada de sinal randômico de um telégrafo, a seguinte expressão foi proposta para  $v_y$ :

$$v_y = \frac{g\bar{c}(1 - \bar{c})}{\hat{L}_y} \quad (30)$$

em que  $g$  é uma constante e  $\hat{L}_y$  é a escala de comprimento integral do processo de cruzamento das flemículas (CANT *et al.*, 2008). A taxa média de reação por cruzamento ( $\omega_y$ ) pode ser expressa pela Equação 31, que se baseia nas propriedades locais das flemículas.

$$\omega_y = \frac{\rho_R u_L^0 I_0}{|\hat{\sigma}_y|} \quad (31)$$

em que  $\rho_R$  é a densidade dos reagentes,  $u_L^0$  é a velocidade de queima laminar planar não tensionada,  $I_0$  é o que representa os efeitos da tensão e da curvatura na velocidade de queima local da chama e  $|\hat{\sigma}_y| = |\overline{\cos \theta}|$  é o fator de orientação da chama, onde  $|\overline{\cos \theta}|$  representa o cosseno médio do ângulo  $\theta$  com que as flemículas cruzam o contorno médio de  $c$  (CANT *et al.*, 2008 e CHANG *et al.*, 2001).

Uma forma alternativa de expressar a taxa média de criação de produtos da combustão por unidade de volume ( $\bar{\omega}$ ) é avaliá-la em relação a área superficial da chama por unidade de volume ( $\Sigma$ ). O conceito é apresentado na Equação 32 e na Equação 33:

$$\bar{\omega} = \rho_R u_L^0 I_0 \Sigma \quad (32)$$

$$\Sigma = \frac{g\bar{c}(1 - \bar{c})}{|\hat{\sigma}_y| \hat{L}_y} \quad (33)$$

Após comparações com dados experimentais, o fator de orientação da chama ( $|\hat{\sigma}_y|$ ) é assumido geralmente como aproximadamente 0,5 (CANT *et al.*, 2008). Porém, o fator



de orientação da chama é também apontado por alguns autores como sendo melhor descrito com o valor de 0,65 (CHANG *et al.*, 2001 e SHY *et al.*, 1996) ou aproximadamente 0,7 (RANASINGHE *et al.*, 2017 e LAHJAILY *et al.*, 1998). O valor mais aceito para a constante  $g$  é aproximadamente 1,5 (CANT *et al.*, 2008), porém, segundo RANASINGHE *et al.* (2017), este valor pode variar a depender da distribuição espacial média de pontos de cruzamento da flemícula na superfície média da variável de progresso. Caso esta distribuição tenha uma característica exponencial, a constante  $g$  assumi o valor de 2,0 e, caso siga uma distribuição de probabilidade beta simétrica, o valor assumido por  $g$  é igual a 1,0. Como apontado também por RANASINGHE *et al.* (2017), o comportamento da distribuição de cruzamentos da flemícula varia entre o exponencial e o simétrico, tendo uma maior tendência ao comportamento simétrico, com um valor médio da constante  $g$  variando normalmente entre 1,7 e 2,0 (CHEW *et al.*, 1990). Uma formulação também sugerida para  $g$ , que tem como objetivo capturar suas variações com relação a variável de progresso da reação é apresentada abaixo (RANASINGHE *et al.*, 2017):

$$g = 1 + 2\bar{c} \quad (34)$$

A escala de comprimento integral do enrugamento da flemícula ( $\hat{L}_y$ ) pode ser correlacionada com a escala de comprimento integral da turbulência ( $L_{turb}$ ), através do seguinte modelo empírico:

$$\hat{L}_y = c_L L_{turb} \left( \frac{u'}{u_L^0} \right)^n \quad (35)$$

em que  $u'$  representa a intensidade de turbulência,  $c_L$  e  $n$  são constantes, sendo geralmente modeladas assumindo valores unitários (CANT *et al.*, 2008). Porém, como apontado por RANASINGHE *et al.* (2017), os valores apresentados na literatura para essas duas constantes podem ser extremamente variados, com a constante  $c_L$  sendo citada com valores como: 0,23 (CHANG *et al.*, 2001); 1,0 (BRAY *et al.*, 1990) e 12,3 (SHY *et al.*, 1996); e a constante  $n$  apresentando valores como: 0,36 (CHANG *et al.*, 2001); 0,41 (SHY *et al.*, 1996); 1,0 (BRAY *et al.*, 1990) e 1,2 (ALURI *et al.*, 2005).

O valor de  $L_{turb}$  pode então ser obtido através da expressão apresentada abaixo:

$$L_{turb} = c_l \left( \frac{u'^3}{\varepsilon} \right) \quad (36)$$

em que  $u'$  representa a intensidade de turbulência e  $c_l$  é uma constante de proporcionalidade de valor aproximadamente igual a 0,76 (RANASINGHE *et al.*, 2017).

Alguns modelos semi-empíricos são baseados na observação de que nem sempre a escala de comprimento integral do enrugamento da flemicula é dependente de  $L_{turb}$ . Um modelo deste tipo é apresentado na Equação 37 e na Equação 38.

$$\hat{L}_y = c_L l_L f\left(\frac{u'}{u_L^0}\right) \quad (37)$$

$$f\left(\frac{u'}{u_L^0}\right) = \left[ \left(1 + \frac{c_{w1}}{u'/u_L^0}\right)^{-1} \left(1 - \exp\left[-\frac{1}{1 + c_{w2}u'/u_L^0}\right]\right) \right]^{-1} \quad (38)$$

em que  $l_L$  é a escala de comprimento da chama laminar,  $c_{w1}$  e  $c_{w2}$  são constantes do modelo que recebem respectivamente os valores de 1,5 e 4,0 (CANT *et al.*, 2008).

## 2.10. PACOTES DE CFD PARA EXPLOSÃO

De forma geral, os pacotes de CFD, que são empregados tanto na indústria quanto na academia, com o objetivo de resolver e analisar problemas complexos envolvendo o escoamento de fluidos, são desenvolvidos para possuírem uma interface amigável com o usuário, de modo a facilitar a entrada de parâmetros e posterior avaliação dos resultados. Os três componentes principais de um pacote de CFD são: o pré-processador, o solver e pós-processador (MALALASEKERA *et al.*, 2007).

Toda a parte inicial da resolução de um problema de CFD é realizada no pré-processador, envolvendo diversas características extremamente importantes do problema, como: definição da geometria; definição do domínio computacional que será resolvido; geração da malha computacional; definição das propriedades do fluido de interesse; seleção das equações e modelos que serão resolvidos; seleção das variáveis que serão monitoradas; definição das condições de contorno; entre outros aspectos relevantes para a simulação. O *solver* é o algoritmo responsável por aplicar todas as características iniciais do problema, que foram especificadas no pré-processamento, as células da malha computacional e, através de um método numérico iterativo, encontrar a solução das equações algébricas, desenvolvidas pelo processo de integração e

discretização das equações de transporte envolvidas no problema. O pós-processador é a ferramenta utilizada para se analisar e apresentar os resultados obtidos através do solver, tendo geralmente funcionalidades como: apresentações em 3D dos resultados; apresentação superficial em cortes 2D; visualização da geometria e malha computacional; apresentação de resultados em vetores; animações das propriedades variando no tempo; entre outras funcionalidades que auxiliam a avaliação dos resultados das simulações (MALALASEKERA *et al.*, 2007).

Atualmente um dos softwares de CFD mais empregados para se modelar a consequência de explosões gasosas na indústria é o *Flame Acceleration Simulator*, mais conhecido pela sigla FLACS<sup>®</sup>, desenvolvido pela GexCon AS. O software é empregado em diversos setores da indústria, tendo como principal objetivo a modelagem de eventos perigosos de grandes escalas (Gexcon, 2021). Por se tratar de um programa comercial, a utilização do FLACS<sup>®</sup> para fins acadêmicos, ligados ao estudo dos princípios por trás da modelagem de explosões gasosas, acaba sendo debilitada, pois seu código fonte não é aberto, o que dificulta o entendimento dos modelos empregados no software.

Para se estudar os princípios da modelagem de explosão, uma opção que vem sendo desenvolvida e aprimorada é o código de CFD *Shock Towards Kinetic Explosion Simulator* (STOKES), desenvolvido na Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), que pode ser empregado em combustões pré-misturadas turbulentas em pequenas e grandes escalas. O STOKES é programado em FORTRAN e resolve todas as equações de Navier Stokes para um escoamento reativo turbulento, sendo a turbulência modelada através da abordagem RANS, aplicando o modelo  $k-\epsilon$ , e a combustão é modelada aplicando o modelo BML, baseado no conceito de flemículas. As equações de transporte e os modelos são resolvidos aplicando uma malha computacional porosa não estruturada, baseada nas diferenças de Minkowski, e avançando no tempo aplicando um algoritmo de Runge-Kutta de quarta ordem (FERREIRA *et al.*, 2019).

## 2.11. VALIDAÇÃO COM DADOS EXPERIMENTAIS

Normalmente os dados mais acurados sobre um processo ou fenômeno físico são obtidos através de medidas experimentais. Contudo, a realização de experimentos em

escalas industriais acaba sendo muitas vezes impossibilitada, tanto por questões de segurança quanto pelo custo envolvido. Uma alternativa aos experimentos é a realização de simulações computacionais que repliquem o fenômeno que se deseja estudar, porém, tais simulações só possuem aplicação prática, caso sejam capazes de prever com acurácia o comportamento dos fenômenos físicos. (PATANKAR, 1980 e MALALASEKERA *et al.*, 2007)

Para se conhecer o quão próximo da realidade as simulações estão, é necessário que os modelos matemáticos aplicados a estas passem por um processo de validação, que é a comparação dos resultados computacionais com os dados de medidas experimentais, que envolvem normalmente a obtenção de informações precisas sobre as condições de contorno do fenômeno físico e uma grade quantidade de dados medidos, como: velocidade do fluido, pressão e temperatura. Dada a escassez de experimentos em escalas industriais, este processo de validação acaba muitas vezes sendo realizado com dados de alta qualidade provenientes de experimentos em escalas menores reportados na literatura, que sejam correlacionados com o fenômeno de interesse, e se assume que a acurácia se manterá em patamares próximos para fenômenos em escalas maiores (PATANKAR, 1980).

Um exemplo de experimento de pequena escala utilizado para validação de modelos de Fluidodinâmica Computacional aplicados a deflagrações de chamas pré-misturadas turbulentas é o experimento da câmara de combustão semiconfinada com obstáculos, desenvolvido por PATEL *et al.* (2002), que tinha como objetivo estudar a combustão de metano em uma câmara com uma sequência de três obstáculos. Este experimento já foi simulado numericamente com sucesso por alguns autores, dos quais podemos citar: PATEL *et al.* (2002), DI SARLI *et al.* (2009) e FERREIRA *et al.* (2019).

Para reproduzir o experimento da câmara de combustão semiconfinada com obstáculos, PATEL *et al.* (2002) utilizou um código de CFD bidimensional, aplicando como modelo de turbulência o  $k-\epsilon$ , com modificações para trabalhar com fluido compressível. No entanto, foram utilizados dois modelos distintos para o cálculo da viscosidade turbulenta, sendo o primeiro o modelo de viscosidade turbulenta linear padrão e o segundo um modelo de viscosidade turbulenta cúbico não linear. O modelo de combustão aplicado, baseado no conceito de flemículas, adicionou uma equação de transporte extra para a área superficial da chama por unidade de volume ( $\Sigma$ ). Os

resultados obtidos aplicando ambos os modelos reproduziram bem os dados experimentais, com um adiantamento da chama numérica da ordem de 2 ms. Contudo, os resultados aplicando o modelo não linear apresentaram uma melhor reprodução da estrutura da chama.

Para uma maior investigação dos dados obtidos por PATEL *et al.* (2002), DI SARLI *et al.* (2009) reproduziram o experimento, aplicando uma técnica de velocimetria de imagem de partícula, em inglês *particle image velocimetry* (PIV), e realizou simulações de CFD aplicando Simulação dos Grandes Turbilhões, em inglês *Large Eddy Simulation* (LES). O modelo de combustão aplicado, baseado no conceito de flemículas, adicionou uma equação de transporte extra para a área superficial da chama por unidade de volume ( $\Sigma$ ), sendo aplicado apenas as escalas inferiores ao tamanho da malha. As simulações com LES apresentaram grande semelhança com os dados experimentais, em aspectos como: comportamento da chama, estrutura da chama, velocidade de avanço e tempo para alcançar o final da câmara de combustão.

O experimento da câmara de combustão semiconfinada com obstáculos também foi simulado numericamente por FERREIRA *et al.* (2019). Para realizar a simulação foi utilizado o programa STOKES, apresentado na seção 2.10. Os resultados obtidos foram consideravelmente semelhantes aos resultados experimentais, principalmente em relação a posição da chama com o tempo e a estrutura desta.

### 3. METODOLOGIA

Com o objetivo avaliar como parâmetros gerais de uma simulação de Fluidodinâmica Computacional (CFD), sendo estes o número de Courant-Fredrichs-Lewy (CFL) e o *Smoth Factor* (SF), apresentados na seção 3.2; e parâmetros específicos do modelo de combustão de Bray, Moss e Libby (BML), sendo estes a constante  $c_L$ , o fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$  e a constante  $g$ , apresentados na seção 3.3, influenciam os resultados obtidos para uma simulação de explosão, foram realizadas diversas simulações de explosão, buscando reproduzir o experimento da câmara de combustão semiconfinada com obstáculos, apresentado de forma prévia na seção 2.11.

O experimento foi desenvolvido por PATEL *et al.* (2002), tendo como objetivo estudar a combustão de metano em uma câmara com uma sequência de três obstáculos. A câmara de combustão do experimento, apresentada na Figura 1, possui 150 mm comprimento, 150 mm de largura e 500 mm de altura, possuindo três obstáculos em seu interior, que medem 75 x 150 x 12 mm cada, existindo entre estes uma distância fixa de 100 mm, a partir da base inferior, onde está posicionado também a fonte de ignição. A câmara é preenchida com uma mistura inflamável de metano e ar que é então ignitada. A base inferior da câmara é fechada, enquanto a parte superior desta permanece aberta durante todo o experimento (PATEL *et al.*, 2002).

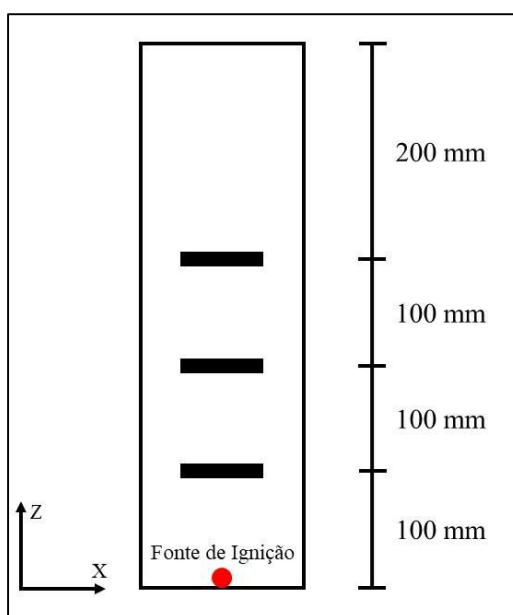


Figura 1 - Representação da câmara de combustão. Baseada em FERREIRA *et al.* (2019).

As simulações de explosão foram realizadas com o programa *Shock Towards Kinetic Explosion Simulator* (STOKES), apresentado na seção 2.10, em um notebook com sistema operacional Linux Mint 19.3 Cinnamon e processador Intel Core i3 com 4GB de memória Ram. A criação da geometria e o pós-processamento das simulações foram realizados utilizando dois programas de código aberto, que podem ser facilmente baixados na internet. A geometria utilizada nas simulações de explosão foi criada através do programa Blender, desenvolvido pela *Blender Foundation*, e toda a parte de pós-processamento das simulações foi realizada utilizando o programa Paraview, desenvolvido por *Sandia National Laboratories*. O cálculo da porosidade (ver seção 2.7) foi realizado por um programa, também desenvolvido na Universidade Estadual de Campinas, chamado de prePro, que acaba por fazer parte do pacote STOKES.

De modo a avaliar a performance do programa STOKES, os resultados obtidos com o mesmo foram comparados com os resultados obtidos com o programa FLACS<sup>®</sup>, da Gexcon, considerado referência de mercado. As simulações com o FLACS<sup>®</sup> foram realizadas de forma remota, nos computadores do Laboratório de Análise de Risco Industrial e Segurança Ambiental (L4R1S4) da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP).

### 3.1. TESTE DE MALHA

A discretização espacial ( $\Delta x$ ) de uma simulação de CFD é realizada através da malha computacional e pode ser considerada um dos parâmetros que mais influencia a simulação, podendo afetar tanto a acurácia dos resultados finais, quanto o tempo necessário para se obter os resultados, visto que uma malha mais refinada demanda um maior poder computacional e tempo de processamento. O objetivo principal, ao se realizar o teste de malha computacional, é encontrar a malha menos refinada possível, ou seja, com o maior  $\Delta x$ , que mantenha a acurácia dos resultados, garantindo assim a confiabilidade dos resultados, com o menor esforço computacional possível.

O programa utilizado para gerar a malha do STOKES gera uma malha hexaédrica uniforme. Sendo assim, com o objetivo de avaliar a influência da discretização espacial nos resultados, foram realizadas 6 simulações, com malhas dos seguintes tamanhos: 1,0

mm; 1,5 mm; 2,0 mm; 3,0 mm; 4,0 mm e 5,0 mm. Os demais parâmetros das simulações que avaliaram a malha são apresentados na Tabela 1, juntamente com as configurações das demais simulações realizadas no presente trabalho, onde casos que foram utilizados em mais de uma das análises mantiveram a numeração original.

Tabela 1 – Configurações das simulações de explosão.

Avaliação	Caso	Malha (mm)	Preliminares		Modelo de Combustão BML		
			CFL	SF	$c_L$	$ \hat{\sigma}_y $	$g$
Malha	1001	1,0	0,4	0,05	2,00	0,5	1,5
	1002	1,5	0,4	0,05	2,00	0,5	1,5
	1003	2,0	0,4	0,05	2,00	0,5	1,5
	1004	3,0	0,4	0,05	2,00	0,5	1,5
	1005	4,0	0,4	0,05	2,00	0,5	1,5
	1006	5,0	0,4	0,05	2,00	0,5	1,5
CFL	2001	3,0	0,1	0,05	2,00	0,5	1,5
	1004	3,0	0,4	0,05	2,00	0,5	1,5
	2002	3,0	0,7	0,05	2,00	0,5	1,5
	2003	3,0	1,0	0,05	2,00	0,5	1,5
SF	2004	3,0	0,4	0,01	2,00	0,5	1,5
	2005	3,0	0,4	0,03	2,00	0,5	1,5
	1004	3,0	0,4	0,05	2,00	0,5	1,5
	2006	3,0	0,4	0,07	2,00	0,5	1,5
$c_L$	3001	3,0	0,4	0,05	0,23	0,5	1,5
	3002	3,0	0,4	0,05	1,00	0,5	1,5
	3003	3,0	0,4	0,05	1,50	0,5	1,5
	1004	3,0	0,4	0,05	2,00	0,5	1,5
	3004	3,0	0,4	0,05	3,00	0,5	1,5
	3005	3,0	0,4	0,05	5,00	0,5	1,5
	3006	3,0	0,4	0,05	12,30	0,5	1,5
$ \hat{\sigma}_y $	3007	3,0	0,4	0,05	1,00	0,3	1,5
	3002	3,0	0,4	0,05	1,00	0,5	1,5
	3008	3,0	0,4	0,05	1,00	0,7	1,5
	3009	3,0	0,4	0,05	1,00	1,0	1,5
$g$	3010	3,0	0,4	0,05	1,00	0,5	1,3
	3002	3,0	0,4	0,05	1,00	0,5	1,5
	3011	3,0	0,4	0,05	1,00	0,5	1,7
	3012	3,0	0,4	0,05	1,00	0,5	2,0



### 3.2. PARÂMETROS PRELIMINARES

Ao se realizar uma simulação de CFD, se faz necessário avaliar a influência que determinados parâmetros podem possuir, de modo a garantir a consistência dos resultados obtidos. Visando avaliar como os parâmetros mais gerais de uma simulação de CFD podem influenciar uma simulação de explosão, dois fatores distintos foram avaliados, sendo estes: o número de Courant-Fredrichs-Lewy (CFL) e o *Smoth Factor* (SF).

O Número de Courant ou Número de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) é responsável por impor uma das condições fundamentais de estabilidade a alguns métodos explícitos, como apresentado na seção 2.5. Como a discretização da malha não varia durante a simulação, o CFL acaba sendo responsável por definir o intervalo de tempo que a simulação avança a cada iteração. Sendo assim, a aplicação de valores mais altos de CFL, mantendo a condição de estabilidade da simulação, acaba sendo mais desejada, visto que isso possibilita o avanço de intervalos de tempo maiores por iteração, diminuindo assim o esforço computacional e tornando a obtenção de resultados mais rápida. O STOKES utiliza como base para seu esquema de resolução numérica o esquema de Lax-Friedrichs, que necessita que o valor do CFL seja menor ou igual a 1,0 para manter a estabilidade da simulação (HIRSCH *et al.*, 2007). Porém, em seu manual, o valor indicado para o CFL é de 0,4. Sendo assim, com o objetivo de avaliar como o CFL influencia os resultados, foram realizadas 4 simulações variando esta constante, que assumiu os seguintes valores: 0,1; 0,4; 0,7 e 1,0. Os demais parâmetros das simulações que avaliaram o CFL são apresentados na Tabela 1.

Durante uma simulação de CFD, quando existe uma alteração brusca nas propriedades calculadas para uma célula computacional, entre um passo de tempo e o passo de tempo seguinte, existe uma grande chance dessa mudança brusca gerar uma instabilidade na solução, podendo levar esta a divergir. O *smooth factor* (SF) é um artifício numérico que tenta evitar estas grandes instabilidades, gerando, como o nome sugere, uma suavização de tais mudanças. Nas simulações de explosão o *smooth factor* pode ser extremamente importante, principalmente no momento da ignição, que é um dos momentos onde esta mudança brusca nas propriedades é esperado. O valor indicado no manual do STOKES para o *smooth factor* é de 0,05. Sendo assim, com o objetivo de avaliar como o *smooth factor* influencia os resultados, foram realizadas 4 simulações

variando este parâmetro, que assumiu os seguintes valores: 0,01; 0,03; 0,05 e 0,07. Os demais parâmetros das simulações que avaliaram o SF são apresentados na Tabela 1.

### 3.3. PARÂMETROS DO MODELO DE COMBUSTÃO

O modelo de combustão utilizado pelo STOKES é baseado no modelo de Bray-Moss-Libby (BML). Sua formulação principal se baseia nas Equações 32, 33 e 37. A Equação 39 apresenta a combinação destas três equações de modo a facilitar o entendimento das correlações entre as variáveis do modelo de combustão.

$$\bar{\omega} = \rho_R u_L^0 I_0 \frac{g\bar{c}(1-\bar{c})}{|\hat{\sigma}_y| c_L L_L f \left( \frac{u}{u_L^0} \right)} \quad (39)$$

Visando a avaliar como os parâmetros do modelo de combustão podem influenciar uma simulação de explosão, foram avaliadas três constantes do modelo, sendo estas: a constante  $c_L$ , o fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$  e a constante  $g$ .

A constante  $c_L$  possui uma ampla faixa de valores apresentado na literatura, que podem variar de 0,23 a 12,3, como apresentado na seção 2.9. O valor indicado no manual do STOKES para a constante  $c_L$  é o de 2,0. Com o objetivo de avaliar como a constante  $c_L$  influencia os resultados, foram realizadas 7 simulações variando esta constante, que assumiu os seguintes valores: 0,23; 1,0; 1,5; 2,0; 3,0; 5,0 e 12,3. Os demais parâmetros das simulações que avaliaram a constante  $c_L$  são apresentados na Tabela 1.

O fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$  corresponde ao cosseno médio do ângulo  $\theta$  com que as flemículas cruzam o contorno médio de  $c$  ( $|\hat{\sigma}_y| = |\overline{\cos \theta}|$ ). Os valores apresentados na literatura para este parâmetro podem variar de 0,5 a 0,7, como apresentado na seção 2.9. O valor indicado no manual do STOKES para a constante  $|\hat{\sigma}_y|$  é o de 0,5. Com o objetivo de avaliar como o fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$  influencia os resultados, foram realizadas 4 simulações variando este parâmetro, que assumiu os seguintes valores: 0,3; 0,5; 0,7 e 1,0. Dado que  $|\hat{\sigma}_y|$  representa o valor absoluto do cosseno médio do ângulo  $\theta$ , não seria coerente avaliar valores fora do

intervalo entre 0,0 e 1,0. Os demais parâmetros das simulações que avaliaram o  $|\hat{\sigma}_y|$  são apresentados na Tabela 1.

A constante  $g$  é uma das constantes dos modelos de combustão de Bray-Moss-Libby (BML), com seu valor podendo variar a depender das características da distribuição espacial média de pontos de cruzamento da flemícula, na superfície média da variável de progresso. Os valores apresentados na literatura para este parâmetro podem variar de 1,0 a 2,0, como apresentado na seção 2.9. O valor indicado no manual do STOKES para a constante  $g$  é o de 1,5. Com o objetivo de avaliar como a constante  $g$  influencia os resultados, foram realizadas 4 simulações variando este parâmetro, que assumiu os seguintes valores: 1,3; 1,5; 1,7 e 2,0. Os demais parâmetros das simulações que avaliaram a constante  $g$  são apresentados na Tabela 1.

Para as simulações que avaliaram o fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$  e a constante  $g$ , optou-se por manter a constante  $c_L$  com o valor de 1,0, pois ao tentar aplicar o valor de 2,0 (indicado pelo STOKES), as simulações com o fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$  maior que 0,5 e a simulação com a constante  $g$  menor que 1,5 não estavam avariando, o que impossibilitaria avaliar a influência deste parâmetro.

## 4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 4.1. RESULTADOS DO TESTE DE MALHA

Esta seção apresenta os resultados obtidos para o teste de malha, seguindo a metodologia apresentada na seção 3.1. A Figura 2 apresenta como a variável de progresso da reação ( $c$ ) avança, para cada uma das simulações, em diferentes passos de tempo, e a Figura 3 apresenta o avanço das chamas. As imagens apresentadas na Figura 2 foram escolhidas de forma a melhor reproduzir visualmente a chama das imagens experimentais, obtidas por DI SARLI *et al.* (2009), mesmo que as simulações estivessem em instantes de tempo distintos dos esperados segundo o experimento.

Vale ressaltar que as simulações com discretizações da malha de 1,0 mm e 1,5 mm não foram apresentadas nas Figura 1 e Figura 3 pois, para tais valores de discretização, que geraram malhas computacionais contendo respectivamente 11.250.000 e 3.330.000 células computacionais, a memória alocada pelo STOKES durante a realização das simulações acabou excedendo a capacidade computacional do notebook que foi utilizado para rodar as simulações.

Através da Figura 2 e da Figura 3, é possível observar que existe uma certa diferença, em relação a posição no tempo, para os resultados obtidos com as malhas de 5,0 mm (Figura 2 (d)) e de 3,0 mm (Figura 2 (b)), indicando uma dependência do resultado em relação a malha. No entanto, os resultados com malha de 2,0 mm (Figura 2 (a)) e de 3,0 mm (Figura 2 (b)) são aceitavelmente semelhantes, indicando uma diminuição da influência da malha nos resultados. Contudo, para se obter o resultado de 2,0 mm foi necessário um tempo de simulação muito maior do que o necessário que para se obter o mesmo resultado com a malha de 3,0 mm. Se optássemos por realizar todas as simulações com um  $\Delta x$  igual a 2,0 mm, o tempo necessário para se obter todos os resultados tornaria o presente trabalho inviável. Sendo assim, com o objetivo de viabilizar uma avaliação mais extensa e qualitativa de parâmetros numéricos e das constantes do modelo de combustão, optou-se por seguir as demais simulações com uma discretização espacial de 3,0 mm.

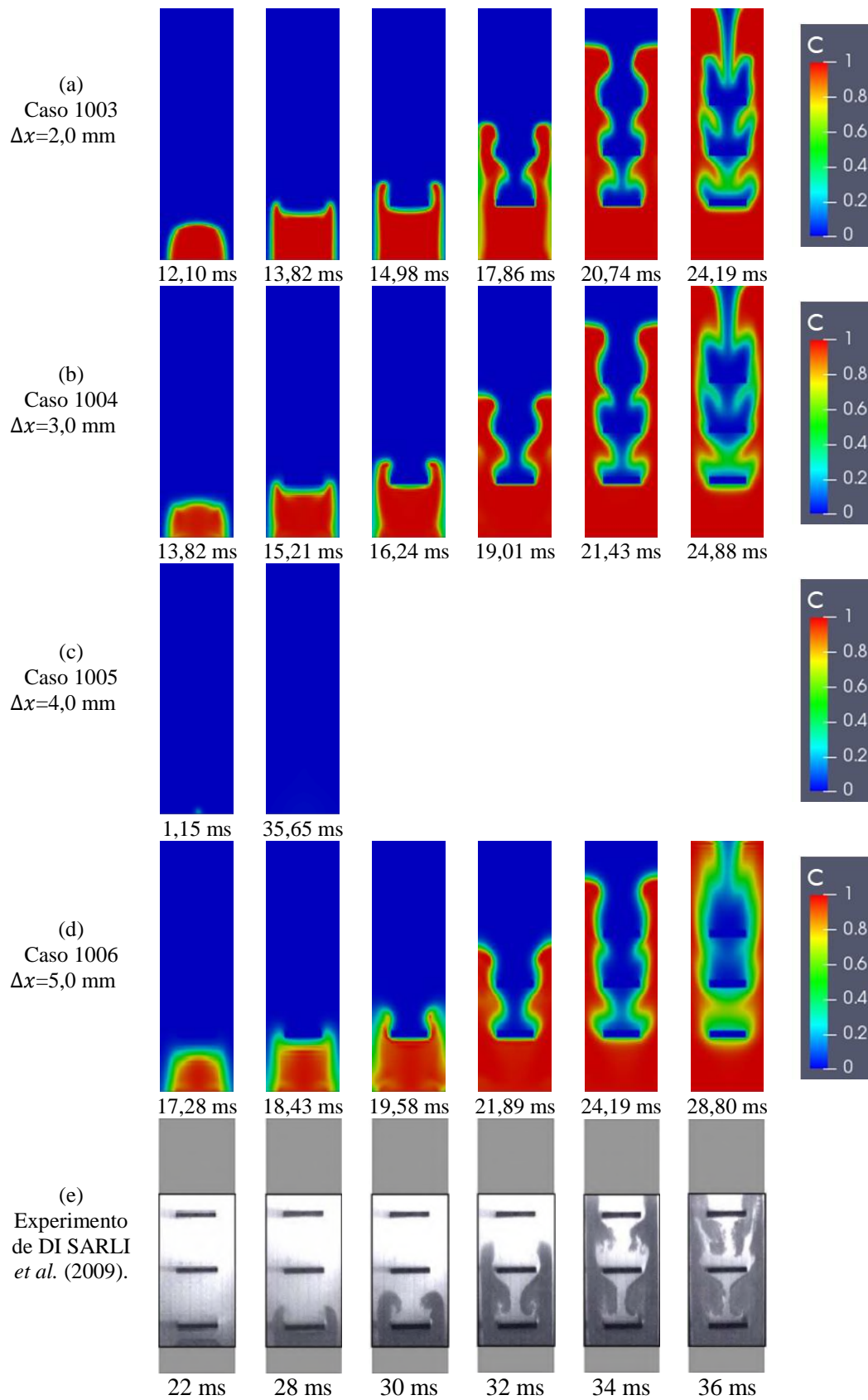


Figura 2 - Resultados variando a discretização espacial  $\Delta x$ : (a) 2,0 mm. (b) 3,0 mm. (c) 4,0 mm. (d) 5,0 mm. (e) Experimento - DI SARLI *et al.* (2009).

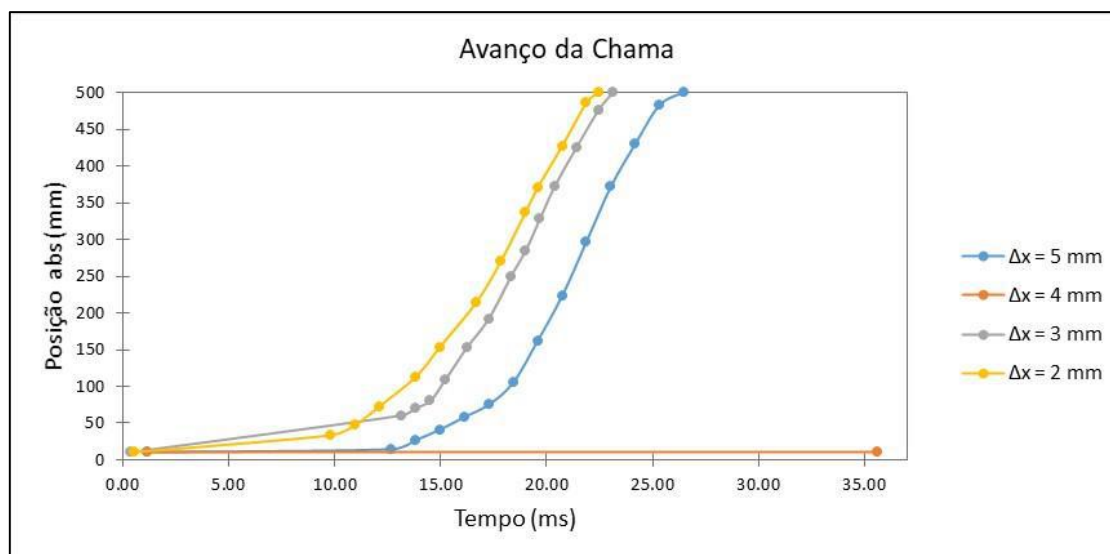


Figura 3 - Avanço da chama variando a discretização espacial.

## 4.2. AVALIAÇÕES PRELIMINARES

### 4.2.1. Número de Courant-Fredrichs-Lewy (CFL)

Esta seção apresenta os resultados obtidos ao se analisar a influência do número de Courant-Fredrichs-Lewy (CFL) sobre as simulações de explosão, seguindo a metodologia apresentada na seção 3.2. A Figura 4 apresenta como a variável de progresso da reação ( $c$ ) avança para cada uma das simulações e em diferentes passos de tempo. As imagens apresentadas foram escolhidas de forma a melhor reproduzir visualmente a chama das imagens experimentais (DI SARLI *et al.*, 2009). A Figura 5 apresenta o avanço das chamas, comparando os resultados das simulações com os dados experimentais.

As simulações aplicando CFL igual a 0,7 e 1,0, apresentadas respectivamente nas Figura 4 (c) e (d), tiveram problemas de estabilidade durante sua execução, que acarretaram que as simulações não conseguissem ser concluídas. Este erro pode ter ocorrido pois os valores de CFL aplicados já estariam muito próximos do máximo possível para o esquema de resolução numérica Lax-Friedrichs, sendo o máximo igual a 1,0, como citado anteriormente. É possível perceber na Figura 5 que o avanço das

chamas aplicando CFL igual a 0,1 e 0,4 foram muito próximos; e que ambas as simulações foram capazes de alcançar o final da câmara de combustão em 500 mm.

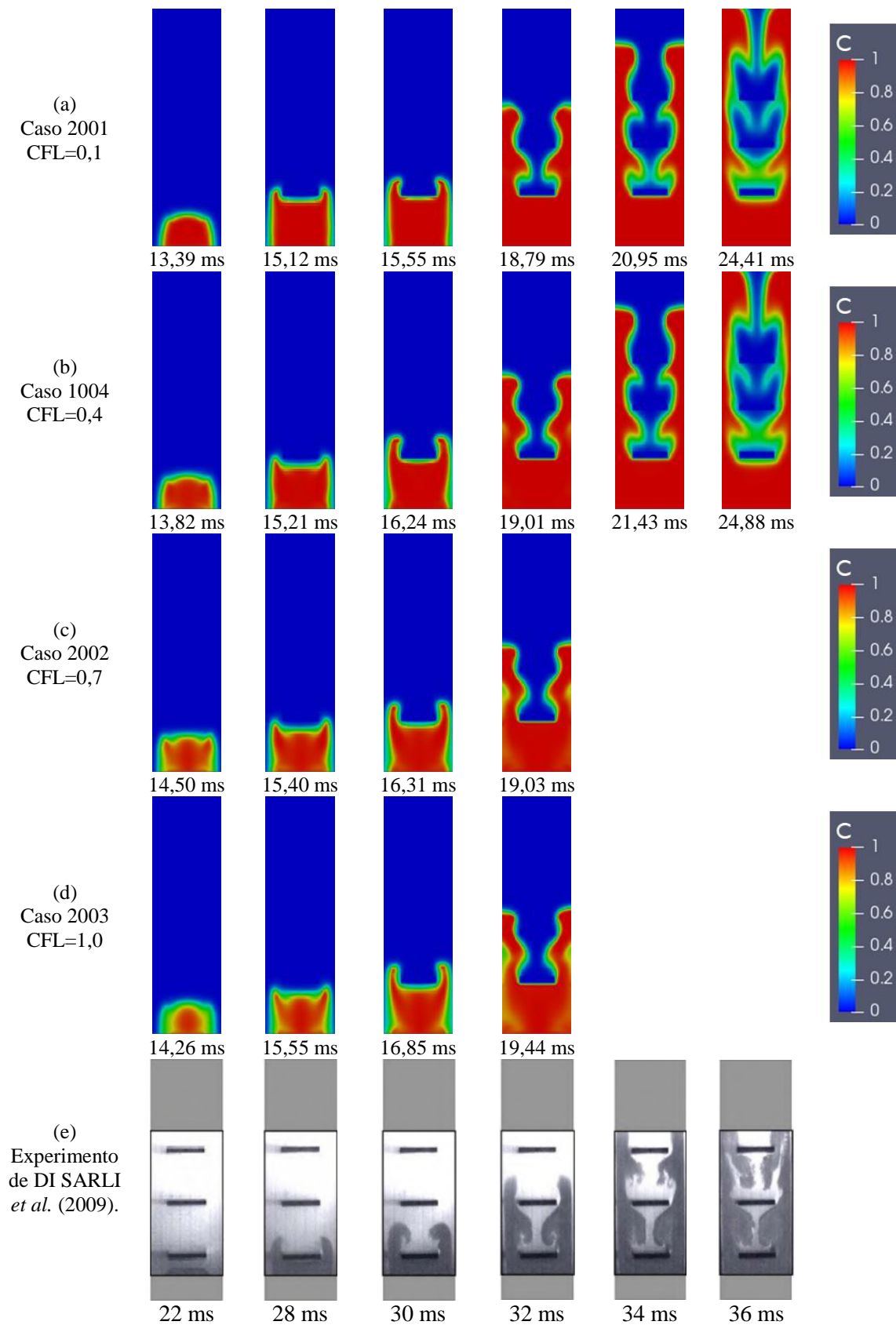


Figura 4 - Resultados variando CFL: (a) 0,1. (b) 0,4. (c) 0,7. (d) 1,0. (e) Experimento - DI SARLI *et al.* (2009).

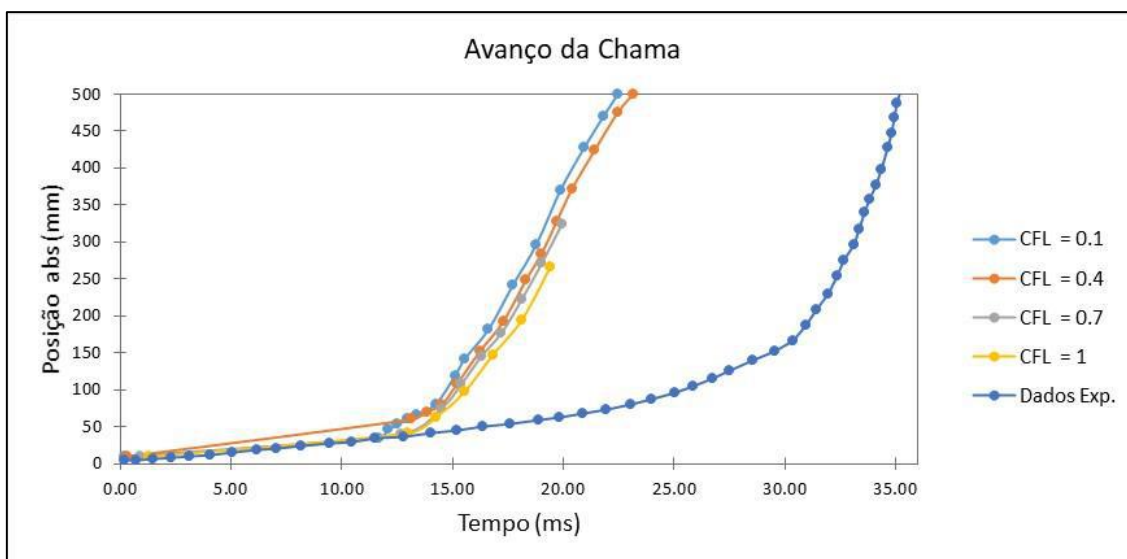


Figura 5 - Avanço da chama variando o CFL.

Para as simulações que não divergiram, é possível perceber que o comportamento do avanço da chama possui características similares aos da curva experimental, com uma taxa de crescimento mais baixa no começo da simulação e um crescimento mais próximo do exponencial ao final.

O intervalo de tempo que a simulação avança por iteração aplicando o CFL igual 0,1 foi de  $4,32e-07$  s e aplicando o CFL igual a 0,4 foi de  $1,72e-06$  s, logo, a simulação com CFL igual a 0,1 precisa de mais iterações que a de 0,4 para alcançar um mesmo tempo computacional. Sendo assim, o valor mais recomendado para o CFL é o de 0,4, pois este possibilita um valor mais alto para o avanço de tempo por simulação, mantendo a estabilidade desta, o que possibilita um menor esforço computacional e a obtenção mais rápida de resultados.

No entanto, para ambos os casos que não divergiram, a chama da simulação ainda apresenta um adiantamento de aproximadamente 12,0 ms em relação aos dados experimentais, com a chama da simulação alcançando o final da câmara de combustão em aproximadamente 23,2 ms e a chama experimental em aproximadamente 35,2 ms. Este adiantamento da chama computacional pode estar associado aos valores atribuídos aos parâmetros preliminares da simulação CFD, investigados na presente seção, às



constantes do modelo de combustão BML, investigados na seção 4.3, ou à limitações intrínsecas da modelagem do programa STOKES, investigados na seção 4.4.

#### 4.2.2. Smooth Factor (SF)

Esta seção apresenta os resultados obtidos ao se analisar a influência do *smooth factor* (SF) sobre as simulações de explosão, seguindo a metodologia apresentada na seção 3.2. A Figura 6 apresenta como a variável de progresso da reação (c) avança para cada uma das simulações e em diferentes passos de tempo. As imagens apresentadas foram escolhidas de forma a melhor reproduzir visualmente a chama das imagens experimentais (DI SARLI *et al.*, 2009). A Figura 7 apresenta o avanço das chamas, comparando os resultados das simulações com os dados experimentais.

Através das Figura 6 e Figura 7, é possível observar que o único valor de *smooth factor* que não gerou divergências nas simulações foi o de 0,05 (Figura 6 (c)). Além disso, podemos perceber que a chama com o valor mais baixo de *smooth factor* (0,01) teve um avanço inicial, porém com um comportamento totalmente atípico e desregular (Figura 6 (c)); e que a chama com o valor mais alto de *smooth factor* (0,07) não conseguiu nem obter um avanço inicial (Figura 6 (d)), demonstrando que a ignição não foi bem sucedida. É possível perceber também que o comportamento do avanço da chama do caso com valor de *smooth factor* igual a 0,05 possui características similares aos da curva experimental, com uma taxa de crescimento mais baixa no começo da simulação e um crescimento mais próximo do exponencial ao final.

Sendo assim, optou-se por manter as demais simulações com SF igual a 0,05, que já era o valor indicado no manual do STOKES e o único que gerou uma simulação capaz de alcançar o final da câmara de combustão em 500 mm. No entanto, mesmo para o caso com valor de *smooth factor* igual a 0,05, a chama da simulação ainda apresenta um adiantamento de aproximadamente 12,0 ms em relação aos dados experimentais, com a chama da simulação alcançando o final da câmara de combustão em aproximadamente 23,2 ms e a chama experimental em aproximadamente 35,2 ms.

Este adiantamento da chama computacional pode estar associado aos valores atribuídos aos parâmetros preliminares da simulação CFD, investigados na presente seção, às constantes do modelo de combustão BML, investigados na seção 4.3, ou à limitações intrínsecas da modelagem do programa STOKES, investigados na seção 4.4.

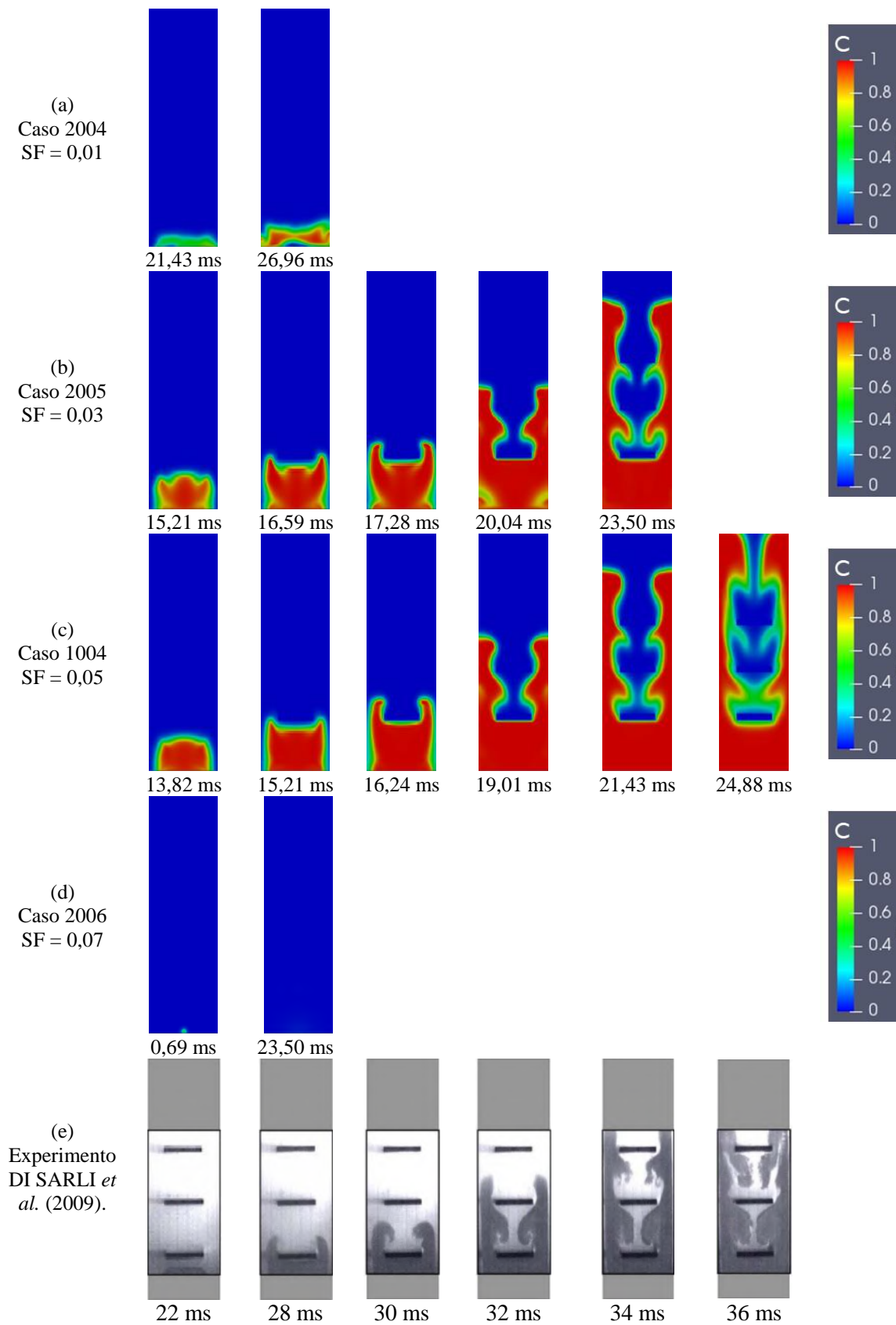


Figura 6 - Resultados variando o *smooth factor* (SF): (a) 0,01. (b) 0,03. (c) 0,05. (d) 0,07. (e) Experimento - DI SARLI *et al.* (2009).

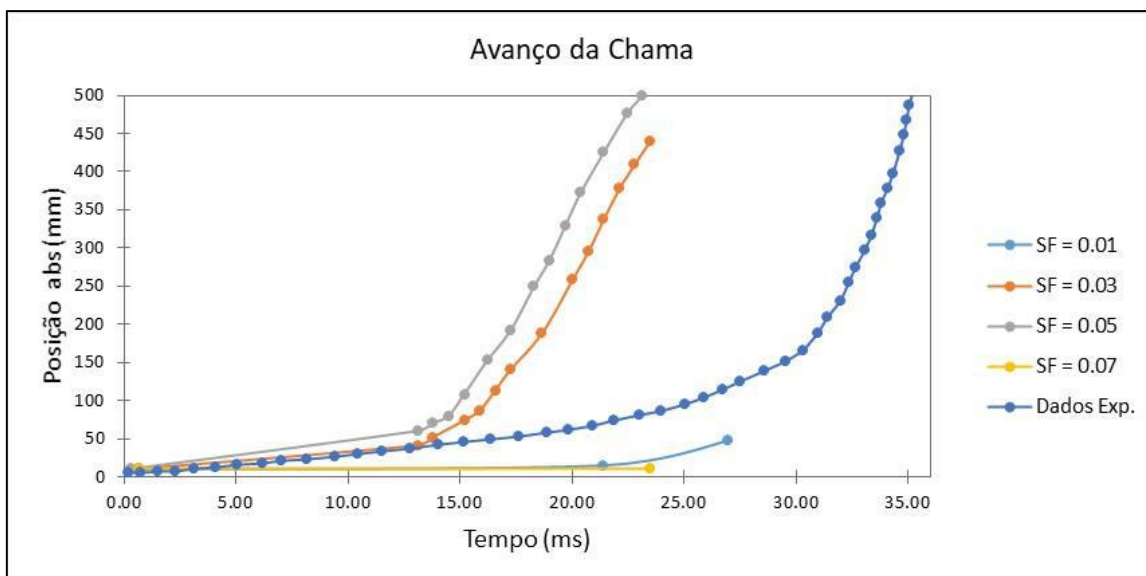


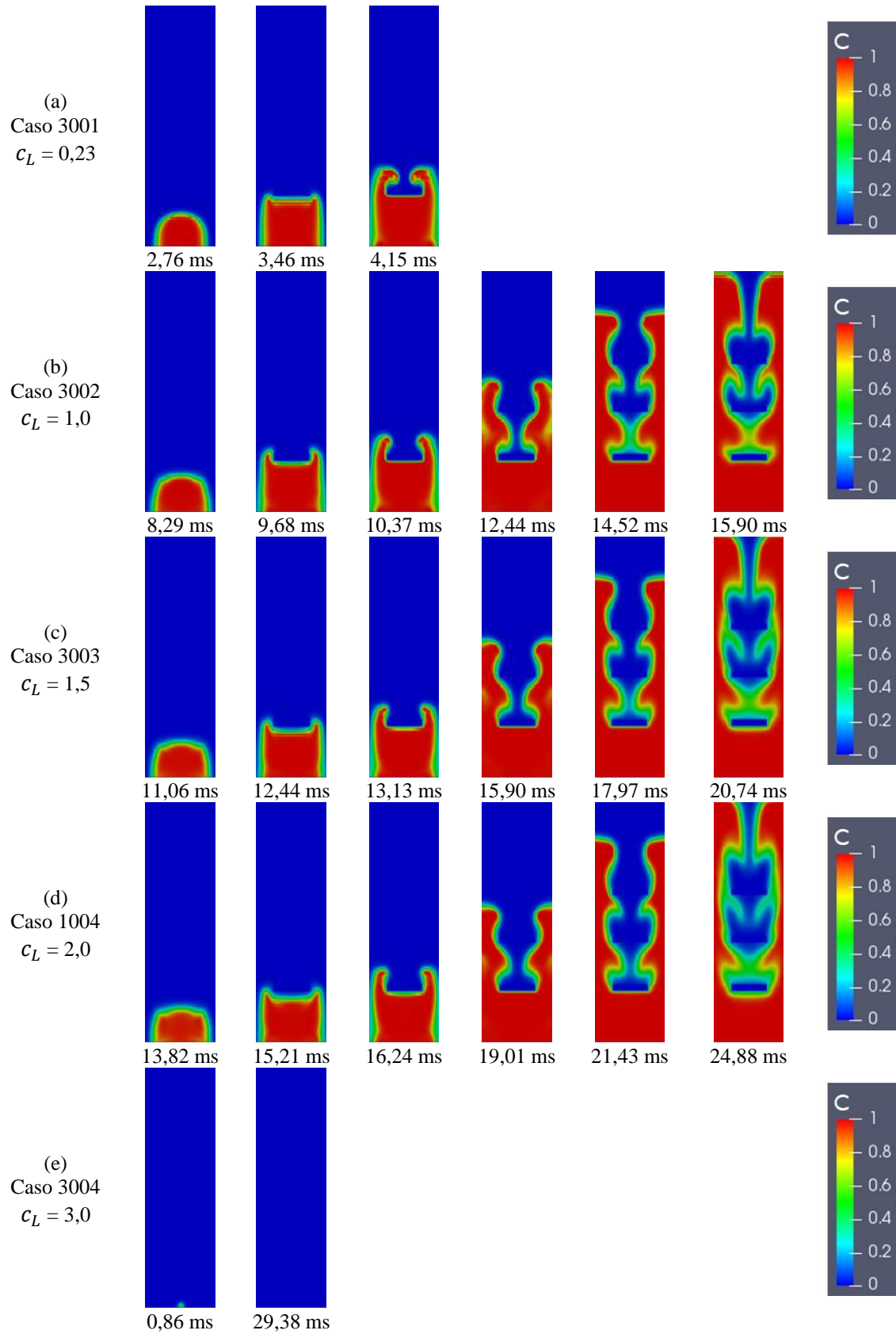
Figura 7 - Avanço da chama variando o SF.

### 4.3. AVALIAÇÃO DO MODELO DE COMBUSTÃO

#### 4.3.1. Constante $c_L$

Esta seção apresenta os resultados obtidos ao se analisar a influência da constante  $c_L$  sobre as simulações de explosão, seguindo a metodologia apresentada na seção 3.3. A Figura 8 apresenta como a variável de progresso da reação ( $c$ ) avança para cada uma das simulações e em diferentes passos de tempo. As imagens apresentadas foram escolhidas de forma a melhor reproduzir visualmente a chama das imagens experimentais (DI SARLI *et al.*, 2009). A Figura 9 apresenta o avanço das chamas, comparando os resultados das simulações com os dados experimentais.

Através das Figura 8 e Figura 9, é possível observar claramente que um aumento no valor da constante  $c_L$  produz uma diminuição na velocidade em que a chama avança. Esse comportamento está de acordo com o esperado ao se observar a Equação 39, onde é possível perceber que a constante  $c_L$  é inversamente proporcional à taxa média de criação de produtos da combustão por unidade de volume ( $\bar{\omega}$ ). Sendo assim, um aumento da constante  $c_L$  gera uma diminuição na taxa de reação da combustão, fazendo com que a chama avance de forma mais lenta. No entanto, por motivos ainda desconhecidos, a partir de  $c_L$  igual a 3,0 (Figura 8 (e)), as simulações acabam divergindo, não sendo capazes de gerar uma chama.



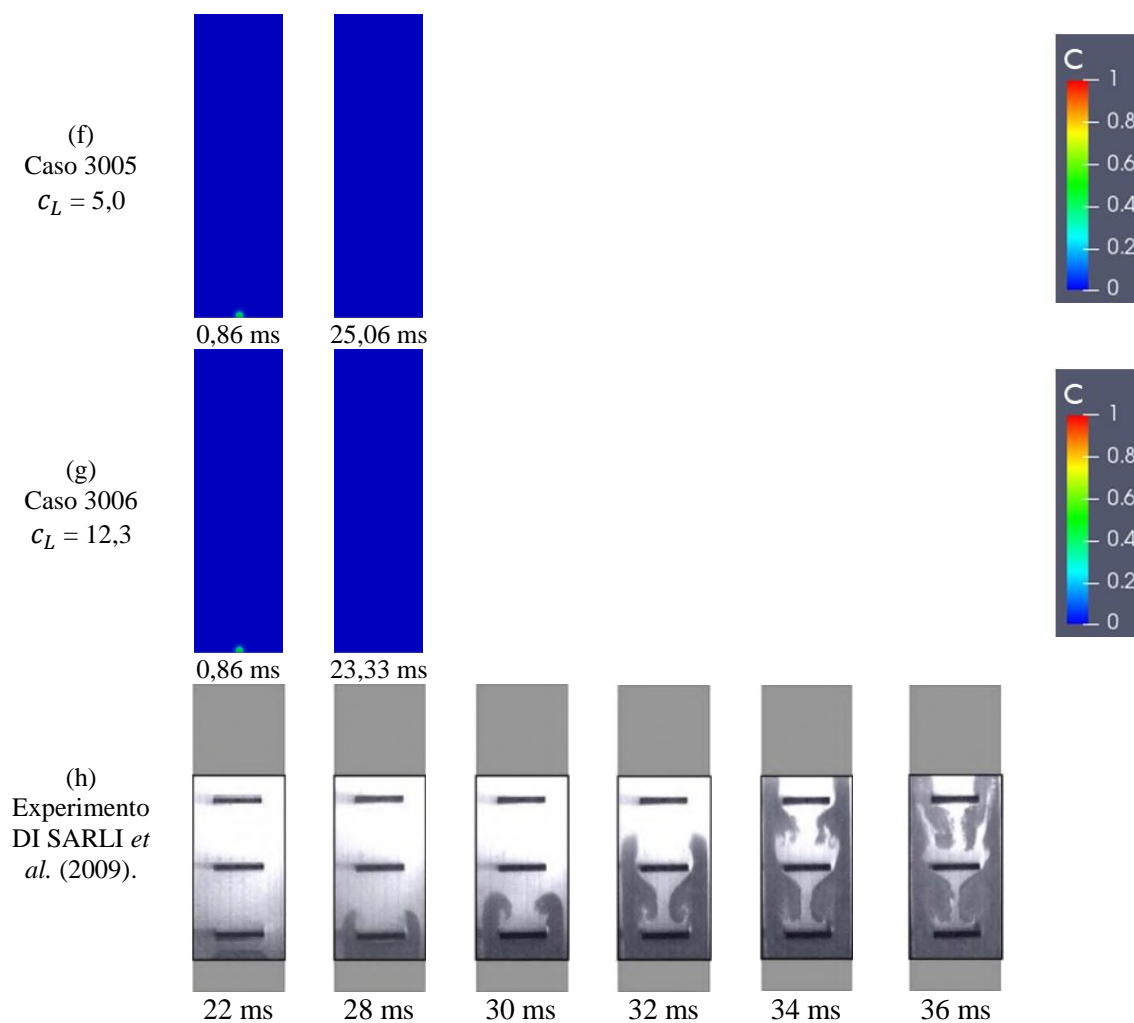


Figura 8 - Resultados variando a constante  $c_L$ : (a) 0,23. (b) 1,0. (c) 1,5. (d) 2,0. (e) 3,0. (f) 5,0. (g) 12,3. (h) Experimento - DI SARLI *et al.* (2009).

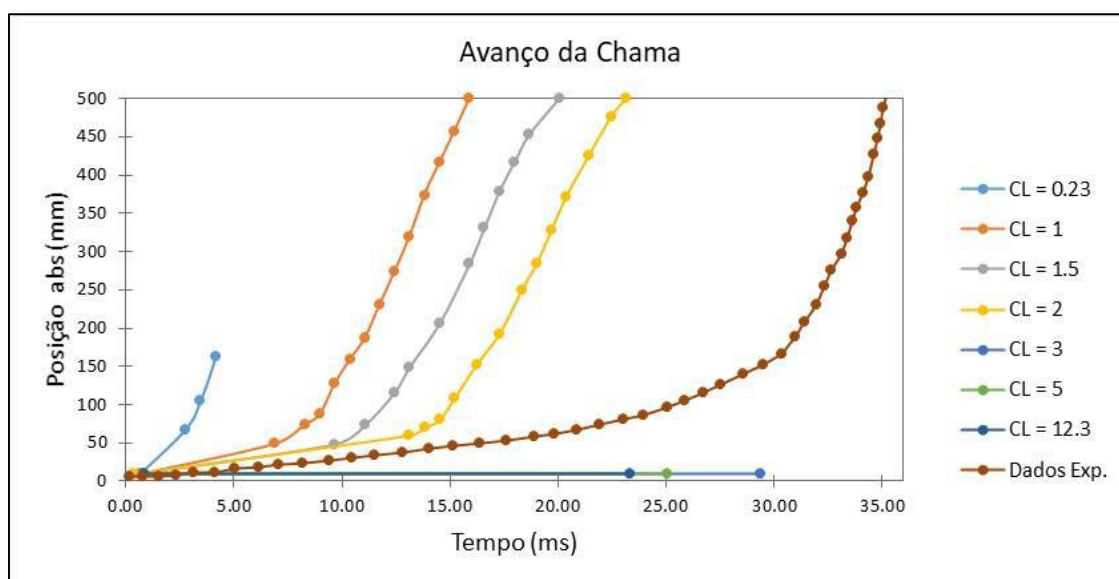


Figura 9 - Avanço da chama variando a constante  $c_L$ .

Para as simulações que não divergiram, é possível perceber que o comportamento do avanço da chama possui características similares aos da curva experimental, com uma taxa de crescimento mais baixa no começo da simulação e um crescimento mais próximo do exponencial ao final.

Por se tratar do caso que chegou mais próximo do experimental e manteve a estabilidade da resolução numérica, pode-se afirmar que o melhor caso é o com  $c_L$  igual a 2,0. Porém, mesmo para o melhor caso, a chama da simulação ainda apresenta um adiantamento de aproximadamente 12,0 ms em relação aos dados experimentais, com a chama da simulação alcançando o final da câmara de combustão em aproximadamente 23,2 ms e a chama experimental em aproximadamente 35,2 ms, o que pode estar relacionado aos valores atribuídos aos parâmetros preliminares da simulação CFD (seção 4.2), às constantes do modelo de combustão BML (presente seção) ou à limitações intrínsecas da modelagem do programa STOKES (seção 4.4).

#### 4.3.2. Fator de Orientação da Chama ( $|\hat{\sigma}_y|$ )

Esta seção apresenta os resultados obtidos ao se analisar a influência do fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$  sobre as simulações de explosão, seguindo a metodologia apresentada na seção 3.3. A Figura 10 apresenta como a variável de progresso da reação (c) avança para cada uma das simulações e em diferentes passos de tempo. As imagens apresentadas foram escolhidas de forma a melhor reproduzir visualmente a chama das imagens experimentais (DI SARLI *et al.*, 2009). A Figura 11 apresenta o avanço das chamas, comparando os resultados das simulações com os dados experimentais.

Através da Figura 10 e da Figura 11, é possível observar claramente que um aumento no valor do parâmetro  $|\hat{\sigma}_y|$  produz uma diminuição na velocidade em que a chama avança. Esse comportamento está de acordo com o esperado ao se observar a Equação 39, onde é possível perceber que o fator de orientação da chama é inversamente proporcional a taxa média de criação de produtos da combustão por unidade de volume ( $\bar{\omega}$ ). Sendo assim, um aumento do fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$  gera uma diminuição na taxa de reação da combustão, fazendo com que a chama avance de forma mais lenta.

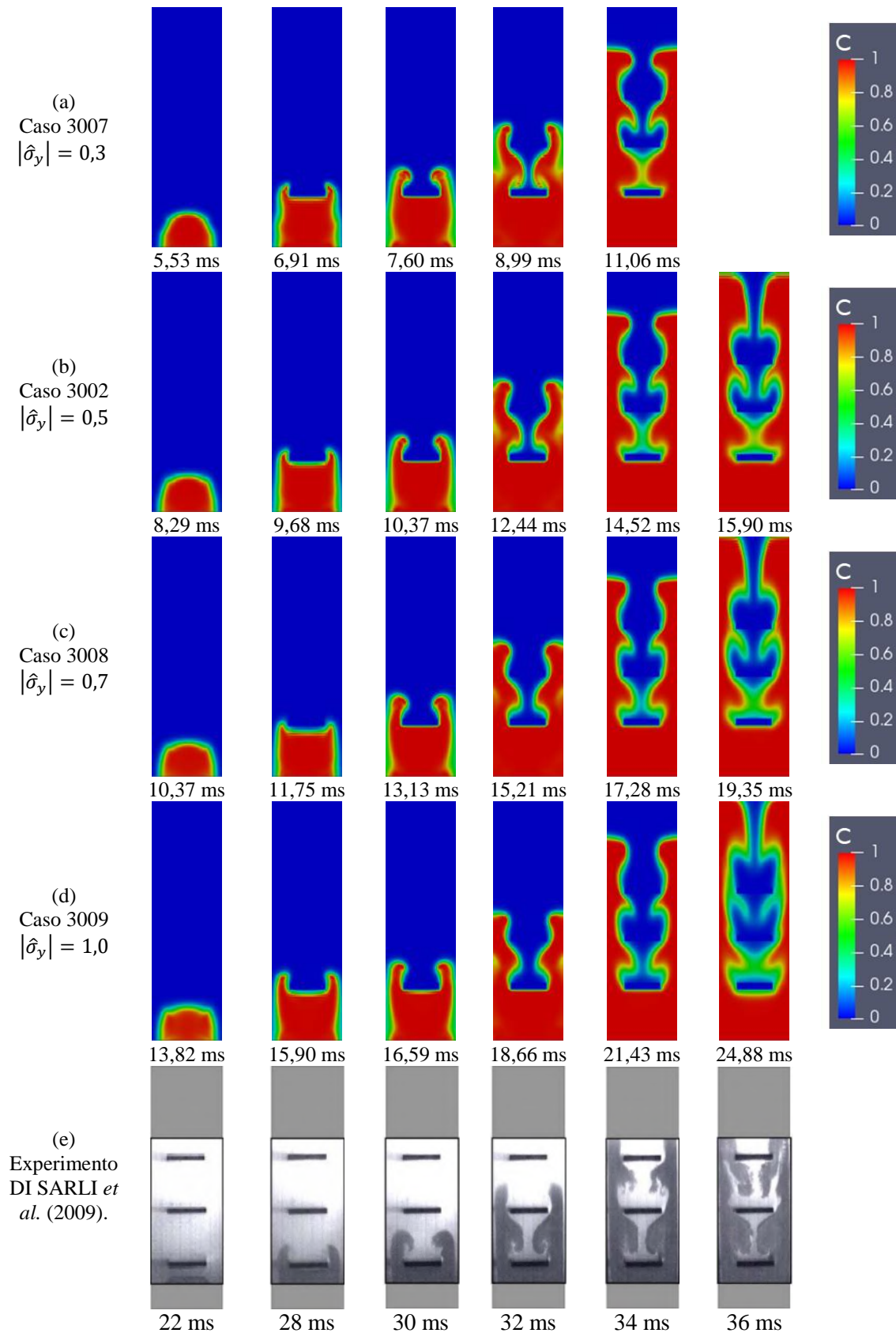


Figura 10 - Resultados variando o fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$  : (a) 0,3. (b) 0,5. (c) 0,7. (d) 1,0. (e) Experimento - DI SARLI *et al.* (2009).

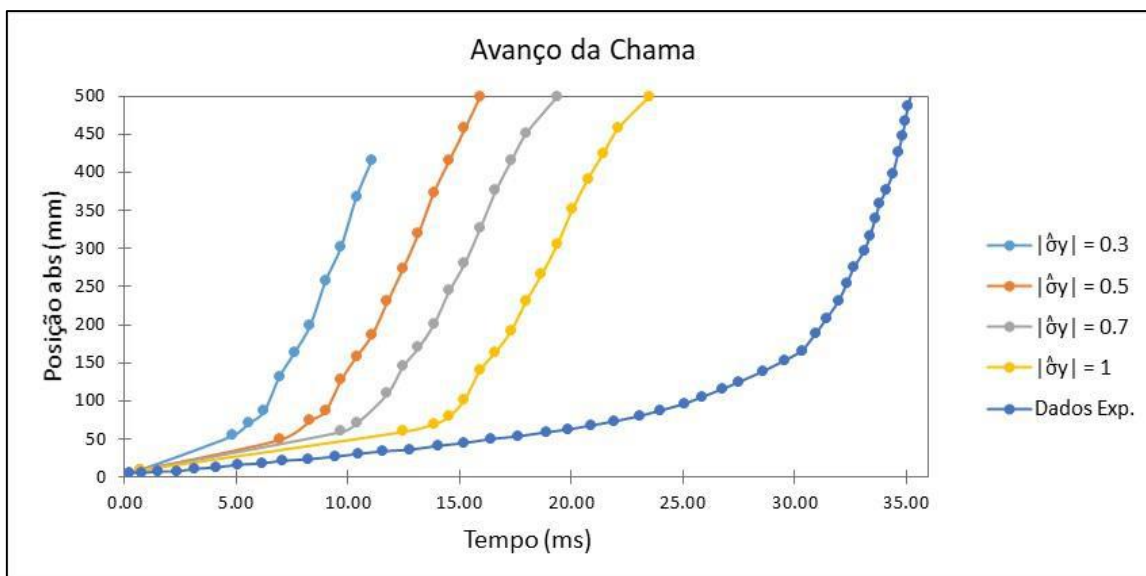


Figura 11 - Avanço da chama variando o fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$ .

Ainda em relação à Figura 11, podemos ver que, por motivos ainda desconhecidos, quando o fator de orientação da chama assumiu o valor de 0,3 (Figura 10 (a)) a simulação acabou divergindo, não sendo capaz de alcançar o final da câmara de combustão. Para as simulações que não divergiram, é possível perceber que o comportamento do avanço da chama possui características similares ao da curva experimental, com uma taxa de crescimento mais baixa no começo da simulação e um crescimento mais próximo do exponencial ao final.

Por se tratar do caso que chegou mais próximo do experimental e manteve a estabilidade da resolução numérica, pode-se afirmar que o melhor caso é o com  $|\hat{\sigma}_y|$  igual a 1,0. Porém, mesmo para o melhor caso, a chama da simulação ainda apresenta um adiantamento de aproximadamente 12,0 ms em relação aos dados experimentais, o que pode estar relacionado aos valores atribuídos aos parâmetros preliminares da simulação CFD (seção 4.2), às constantes do modelo de combustão BML (presente seção) ou à limitações intrínsecas da modelagem do programa STOKES (seção 4.4).



### 4.3.3. Constante $g$

Esta seção apresenta os resultados obtidos ao se analisar a influência da constante  $g$  sobre as simulações de explosão, seguindo a metodologia apresentada na seção 3.3. A Figura 12 apresenta como a variável de progresso da reação ( $c$ ) avança para cada uma das simulações e em diferentes passos de tempo. As imagens apresentadas foram escolhidas de forma a melhor reproduzir visualmente a chama das imagens experimentais (DI SARLI *et al.*, 2009). A Figura 13 apresenta o avanço das chamas, comparando com os dados experimentais.

Através da Figura 13, é possível observar claramente que um aumento no valor da constante  $g$  produz um aumento na velocidade em que a chama avança. Esse comportamento está de acordo com o esperado ao se observar a Equação 39, onde é possível perceber que a constante  $g$  é diretamente proporcional a taxa média de criação de produtos da combustão por unidade de volume ( $\bar{\omega}$ ). Sendo assim, um aumento na constante  $g$  gera um aumento na taxa de reação da combustão, fazendo com que a chama avance mais rapidamente. Ainda em relação à Figura 12, podemos ver que, por motivos ainda desconhecidos, quando a constante  $g$  assumiu os valores de 1,7 (Figura 12 (c)) e 2,0 (Figura 12 (d)) as simulações acabaram divergindo.

Para as simulações que não divergiram, é possível perceber que o comportamento do avanço da chama possui características similares ao da curva experimental, com uma taxa de crescimento mais baixa no começo da simulação e um crescimento mais próximo do exponencial ao final.

Por se tratar do caso que chegou mais próximo do experimental e manteve a estabilidade da resolução numérica, pode-se afirmar que o melhor caso é o com  $g$  igual a 1,3. Porém, mesmo para o melhor caso, a chama da simulação ainda apresenta um adiantamento de aproximadamente 17,9 ms em relação aos dados experimentais, que é maior do que o adiantamento dos melhores casos apresentados nas seções anteriores, com a chama da simulação alcançando o final da câmara de combustão em aproximadamente 17,3 ms e a chama experimental em aproximadamente 35,2 ms, o que pode estar relacionado aos valores atribuídos aos parâmetros preliminares da simulação CFD (seção 4.2), às constantes do modelo de combustão BML (presente seção) ou à limitações intrínsecas da modelagem do programa STOKES (seção 4.4).

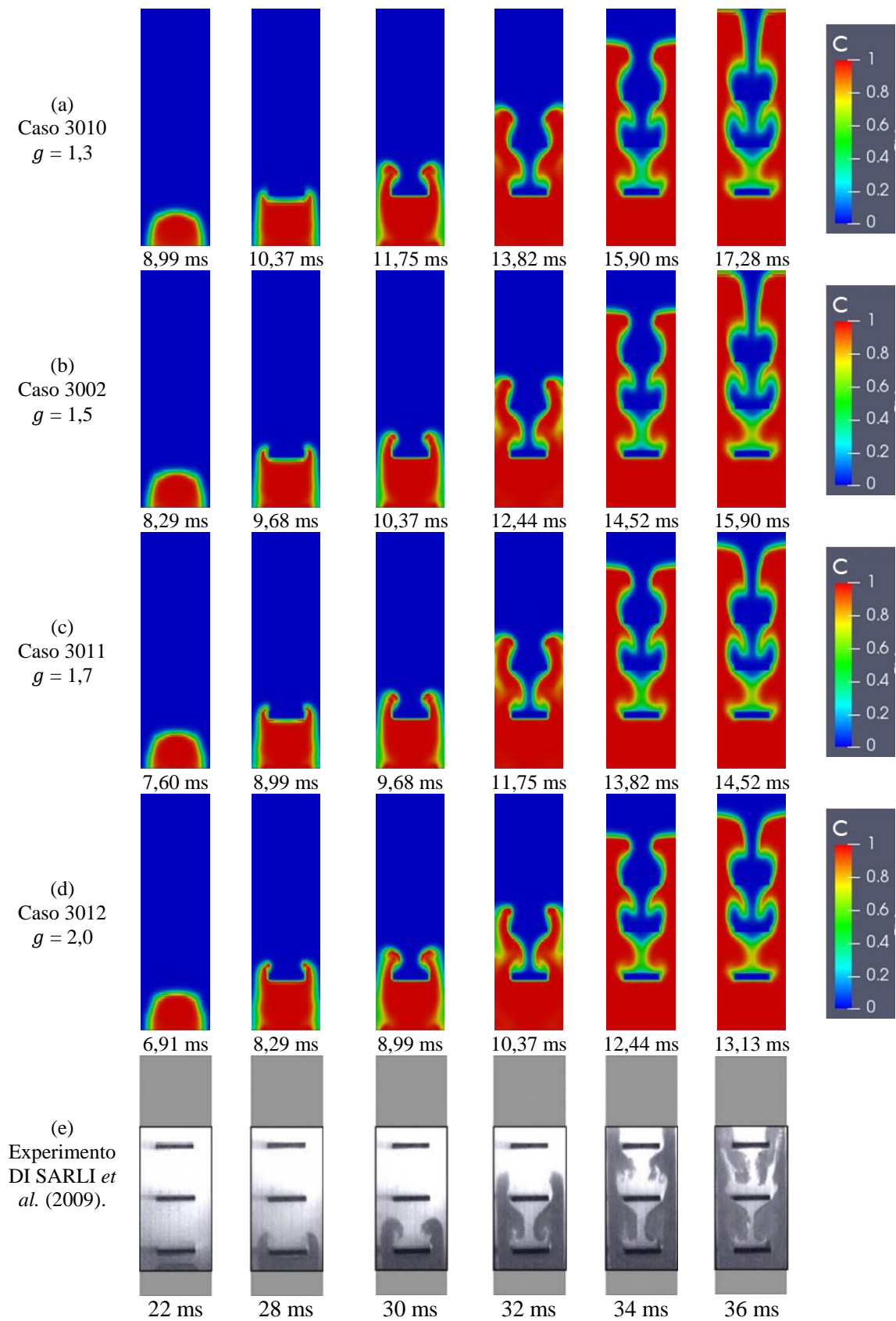


Figura 12 - Resultados variando constante  $g$ : (a) 1,3. (b) 1,5. (c) 1,7. (d) 2,0. (e) Experimento - DI SARLI *et al.* (2009).

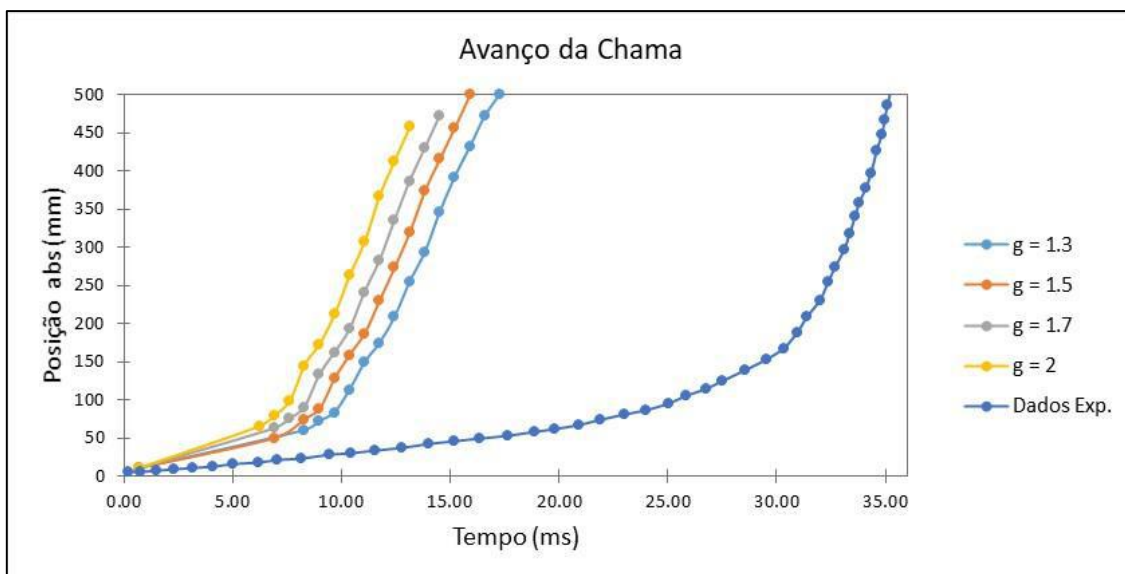


Figura 13 - Avanço da chama variando a constante  $g$ .

#### 4.4. NOVA ABORDAGEM PARA AVALIAÇÃO DO MODELO DE COMBUSTÃO – CONSTANTE GERAL $K$

Como apresentado na seção 4.3, os melhores casos simulados no STOKES ainda apresentavam um adiantamento de aproximadamente 12,0 ms em relação aos dados experimentais. Na tentativa de obter uma combinação das constantes do modelo de combustão, que gerasse uma chama de avanço mais lento, com comportamento mais próximo do experimental, foram realizadas 3 simulações, combinando os valores das constantes que mais atrasaram o avanço da chama, sendo estes:  $c_L = 2,0$ ;  $|\hat{\sigma}_y| = 1,0$  e  $g = 1,3$ . Os valores atribuídos a cada um dos parâmetros avaliados das simulações são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2 – Configurações das simulações de explosão buscando atrasar o avanço da chama.

Caso	Malha (mm)	Preliminares		Modelo de Combustão BML		
		CFL	SF	$c_L$	$ \hat{\sigma}_y $	$g$
4001	3,0	0,4	0,05	2,00	1,0	1,3
4002	3,0	0,4	0,05	2,00	1,0	1,5
4003	3,0	0,4	0,05	2,00	0,7	1,5

No entanto, ao se tentar utilizar as constantes do modelo de combustão para diminuir a velocidade com que a chama avança, todas as 3 simulações acabaram divergindo, não sendo capazes de gerar nenhuma chama, demonstrando a falha no processo de ignição. Este resultado inesperado acabou sugerindo que existe alguma limitação inerente à forma com que o STOKES foi programado, que impede que se obtenha um resultado de chama que avance de forma mais lenta.

De forma a entender melhor esta possível limitação do STOKES, ou dos modelos implementados neste, e como ela se correlaciona com as constantes avaliadas do modelo de combustão, uma nova abordagem foi utilizada. Apesar de cada uma das constantes analisadas na seção 4.3 possuírem um significado físico distinto, ao se avaliar puramente a matemática do modelo de combustão, podemos englobar os parâmetros  $c_L$ ,  $|\hat{\sigma}_y|$  e  $g$  em uma única constante geral, que aqui será denominada  $K$ . Sendo assim, a constante geral  $K$  é apresentada na Equação 40 e sua correspondência no modelo de combustão de BML é apresentada na Equação 41, em concordância com a Equação 39 apresentada anteriormente.

$$K = \frac{g}{|\hat{\sigma}_y|c_L} \quad (40)$$

$$\bar{\omega} = \rho_R u_L^0 I_0 K \frac{\bar{c}(1 - \bar{c})}{l_L f \left( \frac{u'}{u_L^0} \right)} \quad (41)$$

A Figura 14 mostra como a constante geral  $K$  influencia o avanço da chama nas simulações realizadas no STOKES e compara os resultados com os dados experimentais.

Através da Figura 14, é possível observar claramente que um aumento no valor da constante geral  $K$  produz um aumento na velocidade em que a chama avança. Esse comportamento está de acordo com o esperado ao se observar a Equação 41, onde é possível perceber que a constante geral  $K$  é diretamente proporcional a taxa média de criação de produtos da combustão por unidade de volume ( $\bar{\omega}$ ). Sendo assim, um aumento na constante geral  $K$  gera um aumento na taxa de reação da combustão, fazendo com que a chama avance mais rapidamente.

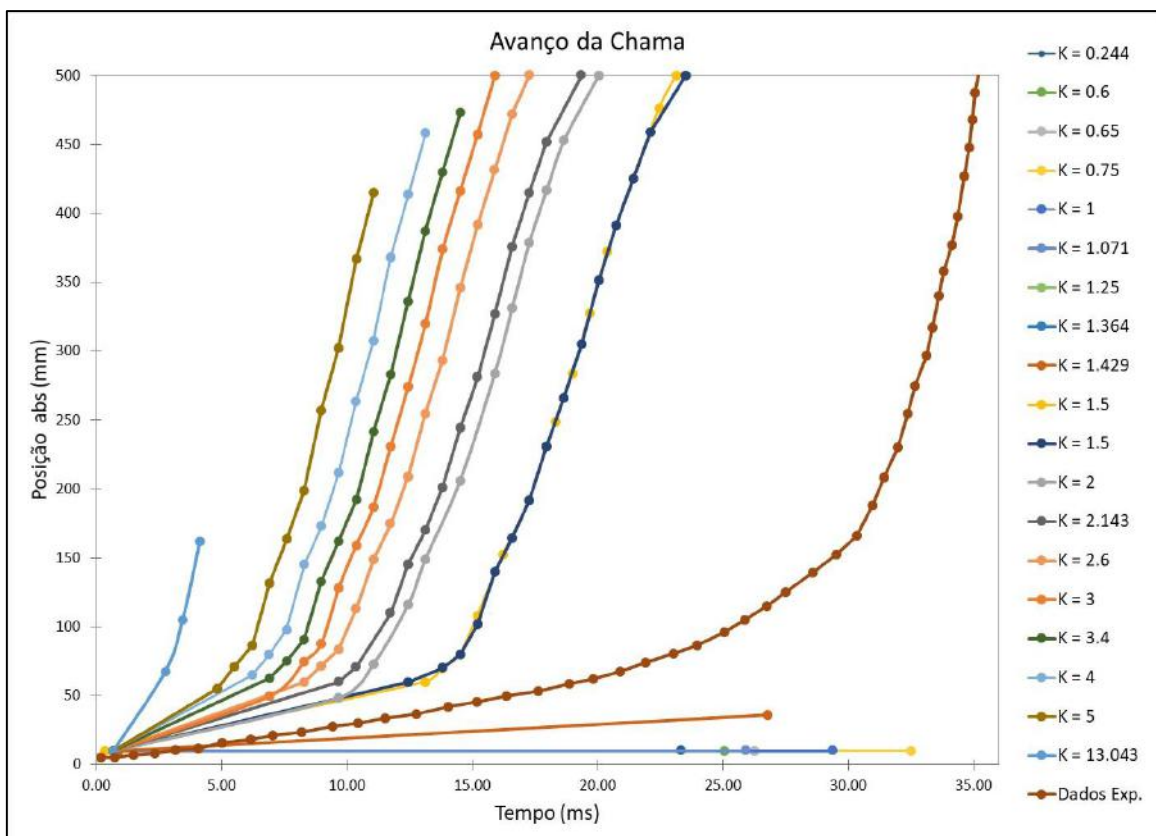


Figura 14 - Avanço da chama com relação a constante geral  $K$ .

Contudo, a informação mais importante obtida através da Figura 14 é o limite de estabilidade das simulações para a constante geral  $K$ . É possível perceber que simulações com  $K$  maiores que 3,0 ou inferiores a 1,5 geraram instabilidade na resolução numérica e levaram a simulação a divergir.

A consistência de se aplicar a constante geral  $K$  também pode ser observada ao se comparar o resultado das duas simulações com  $K$  igual a 1,5. Estas simulações foram rodadas com valores distintos para as três constantes do modelo de combustão, sendo estas, para o primeiro caso:  $c_L = 2,0$ ;  $|\hat{\sigma}_y| = 0,5$  e  $g = 1,5$ ; e, para o segundo caso:  $c_L = 1,0$ ;  $|\hat{\sigma}_y| = 1,0$  e  $g = 1,5$ . No entanto, como pode ser constatado pela Equação 40, a combinação destes valores para os três parâmetros acaba gerando o mesmo valor para a constante geral  $K$ . Podemos perceber que os resultados obtidos para ambas as simulações foram praticamente os mesmos, descontando alguns erros associados a medidas da posição da chama, demonstrando que as três constantes do modelo atuam de forma conjunta no resultado.

Como pode ser observado na Figura 14, não foi possível obter uma chama que apresentasse um adiantamento menor que 12,0 ms em relação à chama experimental. Ao se tentar seguir o caminho de diminuir o valor da constante geral  $K$ , com o objetivo de diminuir a taxa da reação de combustão, desacelerando assim a chama, acabamos esbarrando em uma limitação intrínseca do software STOKES. Uma das causas desta limitação pode estar correlacionada com o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  empregado no STOKES (ver seção 2.6). O modelo  $k-\varepsilon$  é um modelo linear, que possui uma boa atuação em escoamentos com características cisalhantes, o que não necessariamente ocorre durante uma explosão. Além disso, segundo PATEL *et al.* (2002), a aplicação de um modelo de turbulência não linear trouxe melhores resultados ao se simular o experimento da câmara de combustão semiconfinada com obstáculos. Porém, ainda é necessário uma investigação mais profunda do STOKES para entender a causa desta limitação.

#### 4.5. COMPARAÇÃO ENTRE STOKES E FLACS®

O Flame Accelaration Simulator (FLACS®), desenvolvido pela GexCon AS, é um dos softwares de CFD mais empregados para se modelar a consequência de explosões gasosas na indústria, como apresentado na seção 2.10. Contudo, é conhecido que o FLACS® foi desenvolvido para resolver bem explosões de escalas industriais, podendo ser deficiente em simulações de combustão em pequenas escalas, como é o caso do experimento da câmara de combustão semiconfinada com obstáculos.

Com o objetivo de entender como o FLACS® se comporta em simulações de pequenas escalas, foi realizada uma comparação entre o melhor resultado obtido com o STOKES e o resultado obtido com o FLACS®. A Figura 15 apresenta a comparação entre os resultados obtidos com os dois softwares. A Figura 16 compara o avanço das chamas simuladas com os dois softwares e a comparação com os dados experimentais.

A Figura 15 apresenta alguns pontos relevantes em relação aos resultados obtidos com o FLACS®. Primeiramente, podemos perceber que a simulação da explosão com o FLACS® não foi capaz de alcançar o final da câmara de combustão.

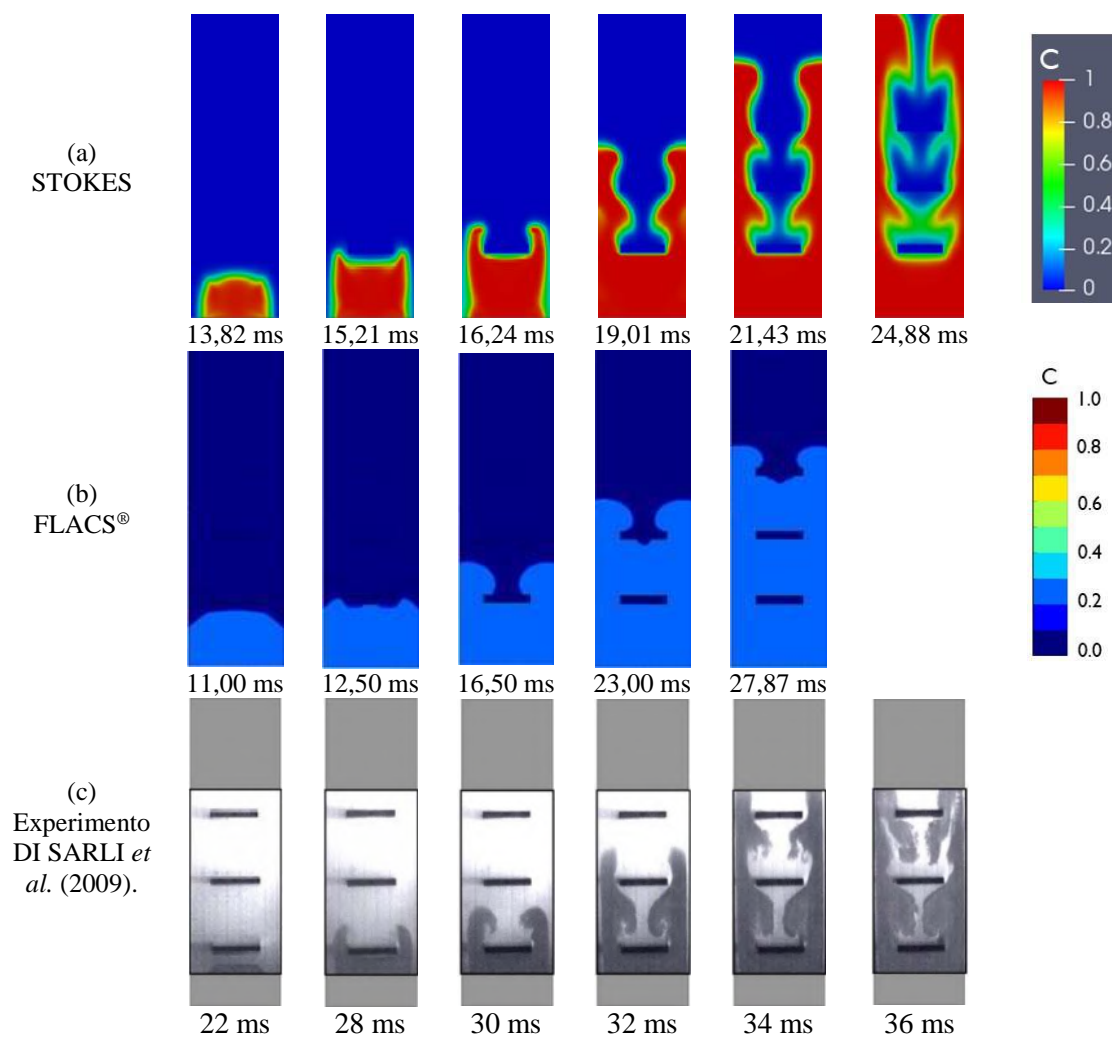


Figura 15 - Comparação entre resultados do STOKES e do FLACS<sup>®</sup>. (a) STOKES. (b) FLACS<sup>®</sup>. (c) Experimento - DI SARLI *et al.* (2009).

A Figura 16 demonstra mais claramente que, para o experimento sendo analisado, a chama do FLACS<sup>®</sup> não foi capaz de progredir até a formação do produto da combustão, se mantendo no patamar inicial e não alcançando o final da câmara de combustão. Vale ressaltar que maiores investigações relacionadas ao FLACS são necessários, buscando entender a influências dos parâmetros de sua modelagem. Além disso, podemos perceber também que, apesar de ainda adiantada em relação os dados experimentais, a chama produzida pelos STOKES reproduz significativamente bem o comportamento da chama experimental.

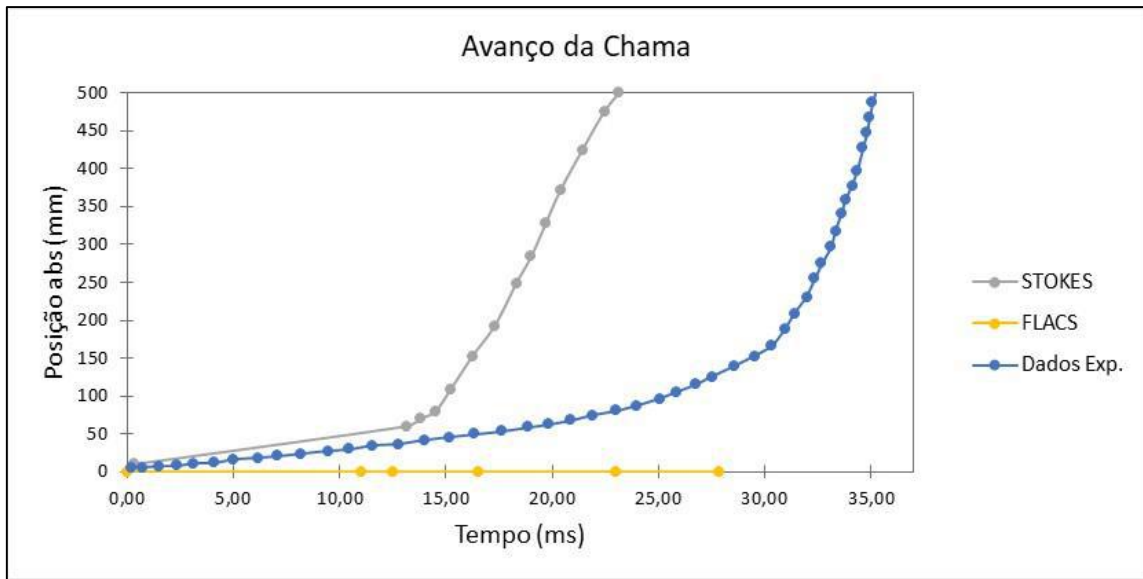


Figura 16 - Comparação do avanço da chama do STOKES e do FLACS®.



## 5. CONCLUSÕES

No presente trabalho foi realizada uma simulação de explosão semiconfinada com obstáculos, em pequena escala, utilizando o programa *Shock Towards Kinetic Explosion Simulator* (STOKES). Foi avaliada a influência de dois grupos de parâmetros numéricos: parâmetros gerais de uma simulação de CFD, sendo estes o número de Courant-Fredrichs-Lewy (CFL) e o *Smooth Factor* (SF); e constantes do modelo de combustão de Bray, Moss e Libby (BML), sendo estas a constante  $c_L$ , o fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$  e a constante  $g$ . Além disso, foi realizada também uma comparação entre os resultados obtidos com o STOKES e os resultados obtidos utilizando o FLACS<sup>®</sup>, programa referência de mercado explosões de grandes escalas.

De forma geral, o software de Fluidodinâmica Computacional (CFD) *Shock Towards Kinetic Explosion Simulator* (STOKES), desenvolvido na Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), se mostrou eficaz ao se simular o experimento da câmara de combustão semiconfinada com obstáculos. As simulações que não divergiram apresentam um comportamento do avanço da chama com características similares ao da curva experimental, com uma taxa de crescimento mais baixa no começo da simulação e um crescimento mais próximo do exponencial ao final destas. Porém, mesmo para o caso que mais se aproximou da curva experimental, a chama da simulação ainda apresenta um adiantamento de aproximadamente 12,0 ms em relação aos dados experimentais, com a chama da simulação alcançando o final da câmara de combustão em aproximadamente 23,2 ms, enquanto a chama experimental alcança o final da câmara de combustão em aproximadamente 35,2 ms.

Em relação à avaliação dos três parâmetros do modelo de combustão utilizado pelo STOKES, que se baseia no modelo de Bray-Moss-Libby (BML), foi observado que estes influenciaram as simulações de explosão de forma coerente à estrutura das equações do modelo de combustão. Mantendo-se constante os demais parâmetros; ao se aumentar o valor atribuído a constante  $g$ , que é diretamente proporcional à taxa média de criação de produtos da combustão por unidade de volume ( $\bar{\omega}$ ), foram observadas simulações com um avanço mais rápido da chama na câmara de combustão; e, ao se aumentar o valor atribuído à constante  $c_L$  e ao fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$ , que

são inversamente proporcionais a  $\bar{\omega}$ , foram obtidas simulações de chamas com um avanço mais retardado.

Foi observado que os resultados das simulações de explosão não foram influenciados de forma individual por nenhum dos três parâmetros avaliados no modelo de combustão, sendo a influência de tais parâmetros constatada de forma conjunta, através de uma constante única, aqui denominada constante geral  $K$ . Sendo assim, mesmo apresentando valores distintos para a constante  $c_L$ , o fator de orientação da chama  $|\hat{\sigma}_y|$  e a constante  $g$ , simulações com o mesmo valor para a constante geral  $K$  apresentaram os mesmos resultados. Foi possível perceber também que simulações com  $K$  maiores que 3,0 ou inferiores a 1,5 geraram instabilidade na resolução numérica e levaram a simulações a divergirem.

Não foi possível obter uma chama que apresentasse um adiantamento menor que 12,0 ms em relação a chama experimental. Ao se tentar seguir o caminho de diminuir o valor da constante geral  $K$ , com o objetivo de diminuir a taxa da reação de combustão, desacelerando assim a chama, foi possível constatar uma possível limitação intrínseca do programa STOKES. Uma das causas desta limitação pode estar correlacionada com o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  empregado no STOKES. O modelo  $k-\varepsilon$  é um modelo linear, que possui uma boa atuação em escoamentos com características cisalhantes, o que não necessariamente ocorre durante uma explosão.

Na comparação entre os resultados obtidos com o STOKES e com o FLACS<sup>®</sup>, programa referência de mercado para explosões em grandes escalas, foi observado que o FLACS<sup>®</sup> não foi capaz de atingir o final da câmara de combustão. Maiores investigações relacionadas ao FLACS, buscando entender a influências dos parâmetros internos de sua modelagem, se fazem necessárias. De forma geral, podemos perceber que, apesar de mais adiantada que os dados experimentais, a chama produzida pelos STOKES reproduz de forma melhor o comportamento da chama experimental, quando os dois programas são empregados para simular o experimento da câmara de combustão semiconfinada com obstáculos, que é considerada uma explosão em pequena escala.

## 5.1. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

O programa STOKES se mostrou eficaz em sua aplicação para realizar simulações de explosão. No entanto, devido às suas limitações inerentes, que foram apresentadas e discutidas neste trabalho, se faz necessário uma maior investigação de formas de melhorar sua performance. Após a execução do presente trabalho, duas linhas de investigações futuras apresentam grande possibilidade de sucesso, a saber:

- Implementação e aplicação de modelos de turbulência com abordagens distintas das do modelo  $k-\varepsilon$ , atualmente empregado no STOKES;
- Implementação de mudanças nas constantes do modelo de combustão BML, tornando estas funções de variáveis da simulação, aplicando fórmulas como a apresentada na Equação 34 para a constante  $g$ .

## 6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALURI, N. K.; PANTANGI, P. K. G.; MUPPALA, S. P. R.; DINKELACKER, F. A numerical study promoting algebraic models for the Lewis number effect in atmospheric turbulent premixed Bunsen flames. *Flow, Turbulence and Combustion*, v. 75, p. 149-172, 2005.

BIRKBY, P.; CANT, R. S.; SAVILL, A. M. The Application of a Laminar Flamelet Model to Confined Explosion Hazards. *Flow, Turbulence and Combustion*, v. 63, p. 361–377, 1999.

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

CANT, R. S.; MASTORAKOS, E. *An introduction to turbulent reacting flows*. [S.l.]: Imperial College Press, 2008.

CHAKRABARTY, A.; MANNAN, S.; CAGIN, T. *Multiscale Modeling for Process Safety Applications*. [s.l.]: Butterworth-Heinemann, 2015.

CHANG, N. W.; SHY, S. S.; YANG, S. I.; YANG, T. S. Spatially resolved flamelet statistics for reaction rate modeling using premixed methane-air flames in a near-homogeneous turbulence. *Combustion and Flame*, v. 127, p. 1880-1894, 2001.

CHEW, T. C.; BRAY, K. N. C.; BRITTER, R. E. Spatially resolved flamelet statistics for reaction rate modeling. *Combustion and Flame*, v. 80, p. 65-82, 1990.

CROWL, D. A.; LOUVAR, J. F. *Chemical Process Safety: Fundamentals with Applications*. 3. ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2011.

DI SARLI, V.; DI BENEDETTO, A.; RUSSO, G.; JARVIS, S.; LONG, E. J.; HARGRAVE, G. K. Large Eddy Simulation and PIV Measurements of Unsteady Premixed Flames Accelerated by Obstacles. *Flow, Turbulence and Combustion*, v. 83, p. 227-250, 2009.

FERREIRA, T. D.; SANTOS, R. G.; VIANNA, S. S. V. A coupled finite volume method and Gilbert–Johnson–Keerthi distance algorithm for computational fluid dynamics modelling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 352, p. 417-436, 2019.

FERREIRA, T. D.; VIANNA, S. S. V. The Gilbert Johnson Keerthi distance algorithm coupled with computational fluid dynamics applied to gas explosion simulation. *Process Safety and Environmental Protection*, v. 130, p. 209–220, 2019.

GATSKI, T. B.; BONNET, J. P. *Compressibility, Turbulence and High Speed Flow*. [s.l.]: Elsevier, 2009.

Gexcon. FLACS-CFD. Disponível em: <https://www.gexcon.com/products-services/flacs-software>. Acesso em: 23 jan. 2021.

HIRSCH, C. *Numerical Computation of Internal and External Flows: Fundamentals of Computational Fluid Dynamic*. 2. ed. [s.l.]: Butterworth-Heinemann, 2007.

LAHJAILY, H.; CHAMPION, M.; KARMED, D.; BRUEL, P. Introduction of dilution in the BML model: application to a stagnating turbulent flame. *Combustion Science and Technology*, v. 135, p. 153-173, 1998.

MALALASEKERA, W.; VERSTEEG, H. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. 2. ed. [s.l.]: Prentice Hall, 2007.

MOUKALLED, F.; MANGANI, L.; DARWISH, M. *The finite volume method in computational fluid dynamics: An advanced introduction with OpenFoam® and Matlab®*. [s.l.]: Springer, 2016.

PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. [s.l.]: Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

PATEL, S. N. D. H.; JARVIS, S.; IBRAHIM, S. S.; HARGRAVE, G. K. An experimental and numerical investigation of premixed flame deflagration in a semiconfined explosion chamber. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 29, p. 1849-1854, 2002.

RANASINGHE, C. P.; MALALASEKERA, W. An improved formulation of the Bray-Moss-Libby (BML) model for SI engine combustion modelling. *Loughborough University Institutional Repository*, 2017.

SHY, S. S.; JANG, R.H.; I, W. K.; GEE, K. L. Three-dimensional spatial flamelet statistics for premixed turbulent combustion modeling. *The Combustion Institute*, p. 283-289, 1996.

VIANNA, S. S. V.; CANT, R. S. Initial phase modelling in numerical explosion applied to process safety. *Process Safety and Environmental Protection*, v. 92, p. 590-597, 2014.

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.