

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
COLEGIADO DE ENGENHARIA MECÂNICA
CURSO ENGENHARIA MECÂNICA

MARCOS DA ROSA TRENTIN

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESPALHAMENTO DE CHAMA SOBRE A
SUPERFÍCIE DE COMBUSTÍVEIS SÓLIDOS ESPESSOS IMPOSTO A UM
ESCOAMENTO CONCORRENTE**

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

GUARAPUAVA

2017

MARCOS DA ROSA TRENTIN

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESPALHAMENTO DE CHAMA SOBRE A
SUPERFÍCIE DE COMBUSTÍVEIS SÓLIDOS ESPESSOS IMPOSTO A UM
ESCOAMENTO CONCORRENTE**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentada como requisito parcial à obtenção do título de graduação, do Departamento de coordenação de engenharia mecânica -COEME - da Universidade Tecnológica Federal do Paraná -UTFPR, como requisito parcial para obtenção do título de Bacharel .

Orientador: Prof. Dr. Sérgio Dalmas

Guarapuava

2017



Ministério da Educação
Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Campus Guarapuava
Coordenação de Engenharia Mecânica
Engenharia Mecânica



2.

3.

TERMO DE APROVAÇÃO

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESPALHAMENTO DE CHAMA SOBRE A SUPERFÍCIE DE COMBUSTÍVEIS SÓLIDOS ESPESSOS IMPOSTO A UM ESCOAMENTO CONCORRENTE

por

MARCOS DA ROSA TRENTIN

Este(a) Trabalho de Conclusão de Curso foi apresentado(a) em 27 de junho de 2017 como requisito parcial para a obtenção do título Bacharel em Engenharia Mecânica. O(a) candidato(a) foi arguido(a) pela Banca Examinadora composta pelos professores abaixo assinados. Após deliberação, a Banca Examinadora considerou o trabalho aprovado.

(Sérgio Dalmas)
Prof.(a) Orientador(a)

(Denise Ramalho)
Membro titular

(Carla Dantas)
Membro titular

- O Termo de Aprovação assinado encontra-se na Coordenação do Curso

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a minha família, por sempre me apoiar em minhas escolhas e em momentos difíceis, agradeço a todos os meus amigos e companheiros, em especial ao meu amigo Rafael Serbay Rodrigues e Rafael de Lima Thomaz, os quais me ajudaram muito na confecção deste trabalho, agradeço a minha namorada Maria Schroeder pelo apoio e companheirismo, agradeço ao meu orientador por me orientar, estando sempre disposto a ajudar a qualquer momento.

"Não é o conhecimento, mas o ato de aprender, não a posse, mas o ato de chegar lá, que concede a maior satisfação"

Carl Friedrich Gauss

RESUMO

ROSA TRENTIN, Marcos. **SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESPALHAMENTO DE CHAMA SOBRE A SUPERFÍCIE DE COMBUSTÍVEIS SÓLIDOS ESPESSOS IMPOSTO A UM ESCOAMENTO CONCORRENTE** 2017. 10 f. Trabalho de Conclusão de Curso – Curso de Engenharia Mecânica, Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Guarapuava, 2017.

Neste trabalho será desenvolvido um código computacional para a solução de um modelo matemático já existente de espalhamento de chama sobre um combustível sólido espesso imposto a escoamento concorrente que consiste num sistema de equações diferenciais parciais bidimensionais transitórias, onde a combustão é modelada pela cinética de taxa finita e a reação de pirolise é modelada pela lei de Arrhenius como uma reação de superfície. A importância do estudo da propagação de chama sobre a superfície de combustíveis sólidos consiste, principalmente, em preocupações na segurança contra incêndios. Com os resultados obtidos do código computacional, será possível observar fenômenos presentes nos processos reais de espalhamento de chama tais como: a estrutura detalhada da chama, ignição, crescimento da chama, formação da pluma de combustão, pluma térmica, região de vaporização, aquecimento de regiões não queimadas devido a condução e advecção de calor da chama, fluxo de vapor etc. Além disto, o código permitirá a variação de vários parâmetros tais como materiais do sólido, concentração de oxigênio e velocidade do escoamento, assim é possível verificar as influências destes parâmetros na formação, crescimento e propagação da chama. Porém, este não é o principal objetivo do trabalho, sendo isto deixado para possíveis trabalhos futuros.

Palavras-Chave: Espalhamento. Chama. Combustíveis. Simulação. Sólido.

ABSTRACT

ROSA TRENTIN, Marcos. **NUMERICAL SIMULATION OF FLAME SPREAD OVER THICK SOLID FUELS IN A CONCURRENT FLOW ENVIRONMENT** 2017. 10 f. Trabalho de Conclusão de Curso – Curso de Engenharia Mecânica, Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Guarapuava, 2017.

In this work an algorithm will be developed to obtain the solution of an already existent mathematical model of flame spread over thick solid fuels in a concurrent flow environment. The mathematical model consists in a system of unsteady two-dimensional differential partial equations, where the combustion is modeled by finite rate kinetics and the pyrolysis reaction is modeled by Arrhenius law as a superficial reaction. The main purpose of studying the flame spread over solid fuels consists, mainly, in fire safety concerns. The solution obtained by the algorithm will allow us to observe the phenomena that is present in the real process of flame spread as: detailed flame structure, ignition, flame growth, formation of the combustion plume, thermal plume, the vaporization region, heating of the unburned regions due to the conduction and advection of heat in the flame, vapor flux etc. Besides, the algorithm will allow the variation of several parameters as the solid materials, oxygen concentration and flow speed, so it is possible to verify the influence of these parameters in the formation, growth and spread of the flame. Despite this it is not the main aim of this work, letting this for possible future works.

Key-Words: Spread. Flame. Fuels. Simulation. Solid.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Configuração do espalhamento de chama em um modelo computacional.....	5
Figura 2 - Diagrama esquemático de um processo de combustão em materiais carboníferos	8
Figura 3 - Diagrama esquemático dos processos de degradação de sólidos carboníferos	10
Figura 4 - Domínio dividido em volumes de controle e sua Nomenclatura.....	30
Figura 5 - Descrição do Modelo de propagação de chama	34
Figura 6 - Campo de temperatura em [K], logo após a ignição	47
Figura 7 - Campos de fração mássica de combustível,(a) logo após a ignição,(b) 0,6 segundos após (a), (c) 1,8 segundos após (a)	47
Figura 8 - Campo da taxa de reação [$\text{g}/\text{cm}^3\text{-s}$] da fase gasosa	48
Figura 9 - Campo de temperatura [K] da fase gasosa, $U_{\text{max}}= 60 \text{ cm/s}$, $t=6\text{s}$	49
Figura 10 - Campo de fração mássica de combustível da fase gasosa, $U_{\text{max}}=60 \text{ cm/s}$, $t=6\text{s}$	49
Figura 11 - Campo de fração mássica de oxigênio da fase gasosa, $U_{\text{max}}=60 \text{ cm/s}$, $t=6\text{s}$	50
Figura 12 - Campo de temperatura do sólido, $U_{\text{max}}=60 \text{ cm/s}$, $t=6\text{s}$	51
Figura 13 - Gráfico da temperatura da superfície do sólido para diferentes tempos.....	51
Figura 14 - Gráfico do Fluxo de Calor sobre a superfície do sólido, $U_{\text{max}}=60 \text{ cm/s}$	52
Figura 15 - Gráfico do Fluxo de Massa devido a reação de pirólise, $U_{\text{max}}=60 \text{ cm/s}$	52

LISTA DE SIMBOLOS

A	Área de um volume de controle
a	Coefficiente estequiométrico
C_p	Calor específico a pressão constante da fase gasosa
C_s	Calor específico da fase sólida
k_s	Condutividade térmica do sólido
k_g	Condutividade térmica do gás
D	Coefficiente de difusão da fase gasosa
μ	Coefficiente da viscosidade
R	Constante universal dos gases
L	Calor Latente da pirólise
ΔH	Calor liberado na combustão por unidade de massa de combustível
x	Coordenada paralela a superfície do sólido
y	Coordenada normal a superfície do sólido
\vec{V}	Campo vetorial de velocidades
ρ_g	Densidade do gás
ρ_s	Densidade do sólido
Δx	Divisão finita espacial da coordenada x
Δy	Divisão finita espacial da coordenada y
α	Difusividade térmica
EDP	Equação diferencial parcial
EDO	Equação diferencial ordinária
E_g	Energia de ativação para a reação da fase gasosa
E_s	Energia de ativação para a reação de pirólise
A_g	Fator pré-exponencial da reação da fase gasosa
A_s	Fator pré-exponencial da reação de pirólise
Y_i	Fração mássica da espécie i

\dot{m}	Fluxo de massa da superfície da fase sólida
M	Massa molar
∇	Operador Nabla
p	Pressão
Δt	Passo de tempo
T_s	Temperatura da fase sólida
T_g	Temperatura da fase gasosa
V	Volume de um volume de controle
u	Velocidade do gás na direção da coordenada x
v	Velocidade do gás na direção da coordenada y

SUBSCRITOS

C	Combustível
O	Oxigênio
P	Produtos da Combustão
0	Condições ambientes
i	i-ésima espécie química
g	Fase gasosa
s	Fase sólida

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

TGA	Termogravimétrica
EDO	Equações diferenciais ordinárias
EDP	Equações diferenciais parciais
PVI	Problema de valor inicial

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Propriedades da fase gasosa	41
Tabela 2 - Propriedades da fase sólida	42
Tabela 3 - Dados para os métodos numéricos	42

1. INTRODUÇÃO.....	15
1.1. OBJETIVOS GERAIS E ESPECÍFICOS	17
1.2. JUSTIFICATIVA.....	17
2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	18
2.1. INTRODUÇÃO	18
2.1.1. Ignição.....	19
2.1.2. Degradação Térmica de Combustíveis Sólidos Orgânicos.....	20
2.2. EQUAÇÕES GOVERNANTES	21
2.2.1. Equações Difusivas-Advectivas-Reativas	22
2.2.2. Equações de Navier-Stokes	23
2.2.3. Equação da Conservação da Massa	24
2.2.4. Equação da Conservação da Quantidade de Movimento	24
2.2.5. Equação da Conservação de Energia.....	25
2.2.6. Equação do Transporte de Espécies.....	26
2.2.7. Equação de Poisson para a Pressão	27
2.2.8. Cinética Química	28
2.3. MÉTODOS NUMÉRICOS	29
2.3.1. Método das Diferenças Finitas.....	29
2.3.2. Método dos Volumes Finitos	30
2.3.3. Método de Newton para Sistema de Equações.....	32
2.3.4. Método das Linhas	34
2.3.5. Integração Temporal: Método de Euler Implícito	34
2.4. MODELO MATEMATICO DO ESPALHAMENTO DE CHAMA.....	35
2.4.1. Modelo	35
2.4.2. Modelo da Fase Sólida.....	36
2.4.3. Modelo da Fase Gasosa.....	36
2.4.4. Condições Iniciais e de Contorno	37
3. METODOLOGIA	39
3.1. DADOS NUMÉRICOS.....	41
3.2. DISCRETIZAÇÃO:EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES	42
3.3 MÉTODOS PARA EQUAÇÕES DIFUSIVA-ADVECTIVA-REATIVA.....	44
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	46
5. CONCLUSÕES	52
6. REFERÊNCIAS	53

1. INTRODUÇÃO

Por "espalhamento de chama" entendemos como o movimento da chama sobre a superfície de um combustível. Pelo fato da chama se espalhar sobre a superfície, muitas complicações aparecem as quais não são encontradas em simples problemas de combustão. Consequentemente estudos de espalhamento de chama são classificados em diferentes maneiras, por exemplo, fisicamente (se o combustível é sólido ou líquido), quimicamente (tipo de combustível), geometricamente (forma do combustível), dinamicamente (direção do escoamento de corrente livre) (Wichman, p.554, 1992).

O estudo de espalhamento de chama em combustíveis sólidos imposto a um escoamento concorrente é motivado por preocupações com a segurança contra incêndio. No escoamento concorrente, a velocidade de propagação da chama é maior do que no escoamento oposto à chama, tornando-a assim, mais perigosa (Zhao, p.1, 2014).

O objetivo final da pesquisa de espalhamento de chama é derivar modelos e dispositivos experimentais que nos permita correlacionar os resultados dos modelos teóricos simplificados e de pequena escala com os problemas práticos atuais de engenharia, como a propagação de fogo (Wichman, p.554, 1992).

O estado da arte da modelagem de incêndio está atualmente relacionado à pobre capacidade de modelar a queima de combustíveis sólidos. As ferramentas de modelagem atuais conseguem fornecer boas previsões dos efeitos térmicos de um fogo (ambiente térmico resultante) mas falha ao prever de forma apropriada o desenvolvimento do fogo (espalhamento da chama e evolução do fogo).

O desenvolvimento de modelos de espalhamento de chama que possam prever de forma precisa a ignição e a queima de combustíveis sólidos será o maior avanço. As empresas de polímeros e indústrias de segurança de incêndio poderão usar esse conhecimento para produzir retardantes baseados nesses princípios (Rein, p.2, 2008).

Muitos pesquisadores realizaram investigações minuciosas sobre os mecanismos físico-químicos presentes no fenômeno de espalhamento de chama, tanto em estudos experimentais quanto na criação de modelos matemáticos. Entretanto, o conhecimento adquirido até agora não é capaz de prever de forma precisa fenômenos importantes tais como ignição, crescimento da chama e extinção. A dificuldade em quantificar o

fenômeno esta associada a complexidade dos fenômenos físicos e químicos presentes tais como: interações químicas entre as espécies voláteis, transferências de massa e calor entre o gás e o sólido, formação de carvão, encolhimento do sólido, gradientes de pressão devido a degradação do sólido, presença de fuligem, porosidade do sólido, etc.

O fenômeno de espalhamento de chama ocorre quando o calor liberado pela combustão é suficientemente forte para que ocorra a vaporização do combustível em regiões não queimadas (chamado de "sólido virgem"). A medida que o combustível evapora, o vapor produzido é carregado por uma corrente convectiva paralela à superfície do sólido, se mistura com o oxigênio que está escoando e é aquecido pelo fluxo de calor gerado pela combustão, e conseqüentemente também entra em combustão, criando assim, um ciclo fechado, o qual é conhecido como espalhamento de chama. A figura 1 mostra um esquema de espalhamento de chama de um modelo computacional.

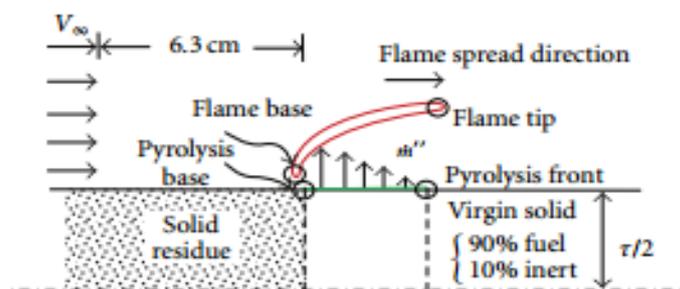


Figura 1 - Configuração do espalhamento de chama em um modelo computacional.

Fonte: T'ien(2012, p.2)

Vários modelos matemáticos foram criados a fim de analisar os mecanismos inerentes ao fenômeno, [1-7], entretanto a quantidade de simplificações fazem com que esses modelos estejam em desacordo com resultados experimentais e sejam insuficientes para fornecer dados quantitativos. Apesar disso, algumas informações qualitativas importantes foram inferidas, tais como: influência da velocidade do escoamento na velocidade de propagação da chama (Di Blasi, 1989), os efeitos da espessura do combustível sólido na propagação da chama (Di Blasi, 1993), os efeitos das propriedades do sólido no espalhamento de chama em compósitos (Di Blasi, Wichman, 1994) etc.

O modelo proposto por Di Blasi (1989) considera, para a fase gasosa, a solução bidimensional transitório das equações de Navier-Stokes em escoamento laminar,

incluindo taxa finita de combustão modelada pela taxa de Arrhenius de segunda ordem. A pirólise do combustível é descrita como uma reação de superfície ocorrente na interface sólido/gás modelada pela taxa de Arrhenius de ordem zero.

Para a fase sólida, o modelo de Di (Blasi,1989) considera a solução transitória bidimensional da equação da conservação de energia. O acoplamento entre os domínios sólido e o gasoso é feito através da reação de pirólise na interface sólido/gás, e o perfil de temperatura da superfície do sólido serve como parâmetro para a reação de pirólise.

1.1. OBJETIVOS GERAIS E ESPECÍFICOS

O objetivo do presente trabalho é realizar a simulação numérica do modelo proposto por Di Blasi (1989) a fim de comparar os resultados obtidos, analisar a velocidade de espalhamento da chama, os fluxos de massa do combustível a medida que a superfície do sólido é aquecida, os campos de temperatura das fases sólida e gasosa, a taxa de calor por condução na interface sólido/gás, frações mássicas dos reagentes e produtos, a taxa de reação e a temperatura adiabática da chama. Para realizar a simulação será criado um algoritmo que irá resolver numericamente as equações do modelo. O algoritmo será feito no software open-source "Python", que oferece uma vasta biblioteca que auxilia na confecção de problemas reais de engenharia.

1.2. JUSTIFICATIVA

O setor de Engenharia de plásticos (Polímeros) é um dos que mais cresce segundo dados da Associação Brasileira da Indústria do Plástico (ABIPLAST), em 2011 o setor foi responsável pela criação de 4 mil postos de trabalho com um crescimento de 1,1% a mais em comparação ao ano de 2010. Em posse disto, é visível o crescimento expansivo do uso de materiais poliméricos tanto na indústria quanto na construção civil, o seu uso tem como justificativa as ótimas propriedades mecânicas que este tipo de material oferece, além de ser barato e relativamente leve.

Infelizmente, este tipo de material quando aquecido, se degrada, liberando voláteis que, em contato com um oxidante, reage liberando uma grande quantidade de calor que se propaga por toda a extensão do material, este fenômeno é conhecido como propagação de chama e deve ser evitado. Para que o uso destes materiais se torne seguro

, é necessário a inclusão de retardantes de chama que tem como objetivo principal impedir que a chama gerada se propague, ou ao menos, demore para se propagar.

Os retardantes tem três mecanismos principais de atuação que devem ser considerados:

- Extinguir a chama antes que ela se propague;
- Reduzir a taxa de espalhamento, de maneira que de tempo suficiente para que as pessoas possam sair do local em segurança;
- Reduzir a emissão de produtos de combustão tóxicos;

Para a produção destes retardantes, torna-se necessário o conhecimento profundo dos mecanismos e parâmetros que afetam a degradação térmica dos materiais e a combustão dos gases voláteis. Existem duas abordagens fundamentais no estudo destes parâmetros, a partir de medições experimentais e modelos teóricos, foi comprovado que os modelos teóricos conseguem simular bem as características qualitativas dos processos envolvidos e com isso conseguem obter dados fundamentalmente importantes.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1. INTRODUÇÃO

O fenômeno de espalhamento de chama envolve complexas interações entre processos físicos e químicos de um combustível sólido e um fluido que escoar sobre sua superfície. Entre estes processos, há a combustão da mistura inflamável, a pirólise do sólido carbonífero, os fenômenos de transporte (massa, quantidade de movimento e transferência de calor), as reações de oxidação, o encolhimento do sólido e a formação de carvão devido a degradação térmica do combustível sólido. A interação entre estes processos estabelece critérios para a ignição, propagação e crescimento da chama.

Quando sujeitos a calor externo, combustíveis sólidos começam a se decompor, gerando um mistura de espécies voláteis e, às vezes, carvão mineral como produto. Os processos de combustão de materiais carboníferos, expostos a um escoamento com a presença de oxigênio, pode progredir por dois caminhos alternativos envolvendo a combustão flamejante e a combustão fumegante, como mostrado, de maneira qualitativa, pelo diagrama esquemática da Figura (2). A condição de combustão

flamejante é alcançada quando o calor liberado pela combustão dos produtos voláteis fornece o fluxo de calor necessário para a degradação do combustível sólido e a propagação da chama. Os processos de combustão flamejante são resultados de complexas interações dos fenômenos de transporte (quantidade de movimento, massa e transferencia de calor) e na fase sólida, degradação térmica do sólido, encolhimento, transferência de massa, gradientes de pressão e muitos outros processos Di Blasi (p.72, 1993).

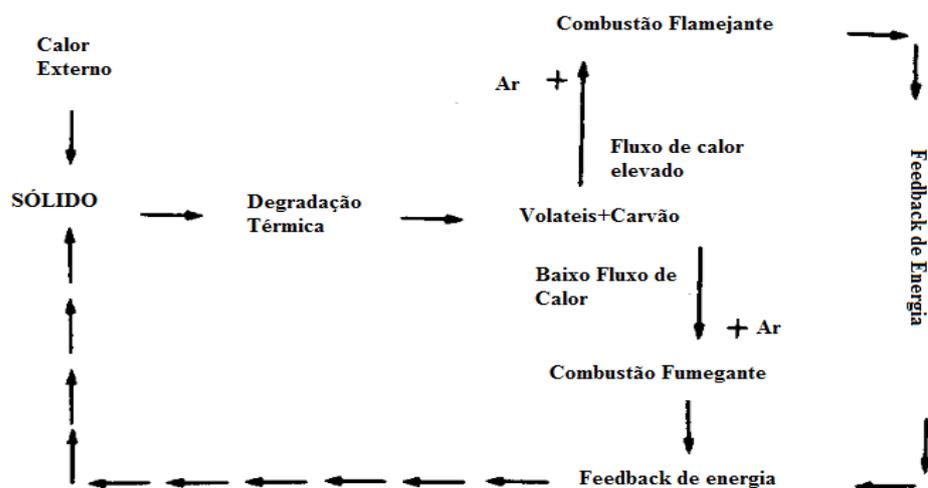


Figura 2 - Diagrama esquemático de um processo de combustão em materiais carboníferos

Fonte: Di Blasi (p.74, 1993)

2.1.1. Ignição

A ignição é o primeiro passo para que ocorra a combustão da mistura e consequente espalhamento da chama. Para que ocorra a ignição alguns processos devem estar presentes tais como a vaporização do sólido, formação de uma mistura inflamável adjacente a superfície do sólido e a iniciação e sustentabilidade de reações de oxidação Di Blasi (p.72,1993).

De acordo com Di Blasi (p.72,1993), para conseguir ignição flamejante, 3 condições devem ser atendidas:

1. Combustível e oxigênio devem estar disponíveis a um nível apropriado de concentração para que se tenha uma mistura dentro dos limites de flamabilidade.

2. A temperatura da fase gasosa deve alcançar valores suficientemente altos para iniciar e acelerar a reação de combustão.
3. A extensão da zona aquecida deve ser suficientemente grande para superar as perdas de calor.

A temperatura da mistura acima da superfície possui um papel crucial para a ocorrência da ignição. Existem várias maneiras na qual esta mistura pode ser aquecida, pode ser pela transferência de calor da superfície quente do sólido ou por dispositivos capazes de criar regiões de alta temperatura na fase gasosa, como por exemplo as chamas piloto, faíscas e fios quentes.

Portanto, para que ocorra a ignição, condições favoráveis devem ser reproduzidas na fase gasosa. Após a ignição, condições apropriadas podem permitir a propagação da chama. Em geral, a taxa de espalhamento é determinada pelo retorno de energia da região quente do sólido para a região não queimada, enquanto que a taxa de queima é determinada pela transferência de calor da chama para o sólido abaixo da chama Di Blasi (p.72,1993).

2.1.2. Degradação Térmica de Combustíveis Sólidos Orgânicos

A madeira é um dos principais combustíveis sólidos formadores de carvão. Sua estrutura é anisotrópica e portanto suas propriedades físicas variam ao longo de seu volume (difusividade térmica e permeabilidade). A madeira é basicamente composta de celulose (50%), hemicelulose (25 %) e lignina (25%), a proporção destes componentes variam para diferentes espécies de madeira (Di Blasi, p.73,1993).

As análises termogravimétricas (TGA) indicaram que a hemicelulose é o componente menos termicamente estável, a lignina é o componente que possui a maior tendência em formar carvão, enquanto a hemicelulose e a celulose se decompõem em produtos voláteis em temperaturas acima de 300°C Di Blasi (p.71, 1993).

As espécies químicas liberadas como produto da reação de pirólise são numerosas e, para simplificar a análise, essas espécies são agrupadas em 3 principais componentes: carvão, alcatrão e gases. O grupo do carvão é constituído por resíduos não voláteis que são ricos em carbono. Alcatrão são todos os produtos que possuem alto peso molecular, são voláteis na temperatura de pirólise, porém se condensam em baixas temperaturas (temperatura ambiente). O grupo dos gases são todos as espécies de baixo

peso molecular (tais como CO_2 e CO), e possuem uma pressão de vapor mensurável a temperatura ambiente Di (Blasi, p.73,1993).

A Figura 3 traz um diagrama esquemático dos processos físicos e químicos que ocorrem na degradação térmica de combustível sólido orgânico (produz carbono como resíduo sólido).

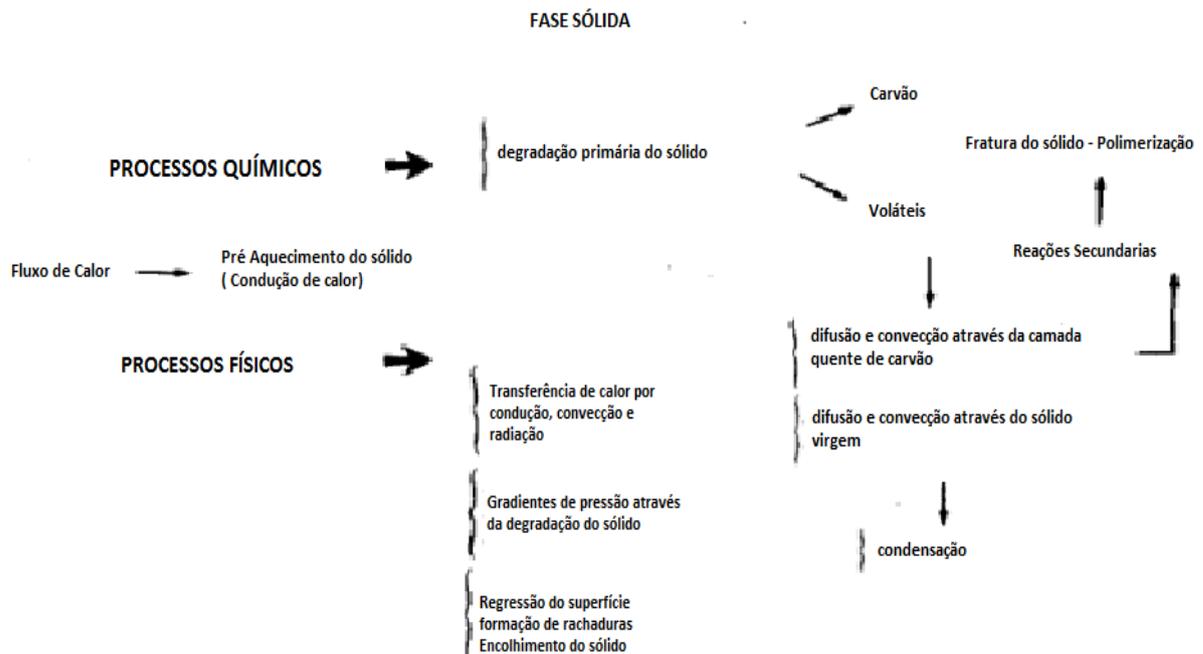


Figura 3: Diagrama esquemático dos processos de degradação de sólidos carboníferos

Di Blasi(p.72, 1993)

2.2. EQUAÇÕES GOVERNANTES

O modelo proposto por Di Blasi (1989) considera uma chama laminar difusiva em um escoamento concorrente que inclui um conjunto de equações diferenciais parciais não lineares e acopladas que deverão ser resolvidas numericamente utilizando o método dos volumes finitos.

O modelo considera dois domínios matemáticos, um para o sólido e um para a fase gasosa, que devem ser acoplados por condições de contorno que estabelecem a conectividade entre o sólido e o gás a cada passo de tempo.

Para a fase gasosa, o conjunto de equações considera o modelo transitório bidimensional laminar das equações de Navier-Stokes, a equação da conservação das espécies químicas que serão abordadas no modelo, incluindo a cinética química das espécies que serão modeladas pela relação de 1º ordem de Arrhenius, a reação de combustão será modelada por uma reação exotérmica global.

Para a fase sólida, o modelo considera a forma bidimensional transitória da equação da conservação de energia, essas equações formam um sistema de equações acopladas que deverão ser resolvidas simultaneamente para cada passo de tempo.

A fim de fornecer um background teórico, as equações, o modelo e os métodos numéricos utilizados serão sucintamente citados neste trabalho.

2.2.1. Equações Difusivas-Advectivas-Reativas

A modelagem padrão da advecção-difusão-reação prevê a evolução temporal de espécies químicas ou biológicas em um meio fluido tais como água ou ar. As equações matemáticas que descrevem essa evolução são equações diferenciais parciais (EDP's), que são derivadas através de balanços de massa.

Considere a concentração $u(x, t)$ de uma certa espécie, com variável espacial $x \in \mathbb{R}$ e temporal $t \geq 0$. Considere um pequeno $h > 0$, e uma concentração média $\hat{u}(x, t)$ em uma célula $[x - 1/2h, x + 1/2h]$. Então

$$\hat{u}(x, t) = \frac{1}{h} \int_{x-\frac{1}{2}h}^{x+\frac{1}{2}h} u(s, t) ds = u(x, t) + \frac{1}{24} h^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) + \dots$$

Se as espécies são carregadas por um meio fluido com velocidade $v(x, t)$, então a lei da conservação da massa implica que a mudança de $\hat{u}(x, t)$ por unidade de tempo é o balanço dos fluxos que entram e que saem das fronteiras da célula, isto é

$$\frac{\partial \hat{u}(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{h} \left[v \left(x - \frac{1}{2} h, t \right) u \left(x - \frac{1}{2} h, t \right) - v \left(x + \frac{1}{2} h, t \right) u \left(x + \frac{1}{2} h, t \right) \right]$$

onde $v(x \pm 1/2 h, t)u(x \pm 1/2 h, t)$ são os fluxos de massa que entram e saem dos contornos da célula. Se tomarmos $h \rightarrow 0$ temos que a concentração satisfaz a seguinte equação

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} (v(x, t)u(x, t)) = 0. \quad (1)$$

A qual é chamada de equação advectiva (ou convectiva). De maneira similar consideramos o efeito da difusão. Sabendo que a variação de $\hat{u}(x,t)$ é causada pelos gradientes da solução e os fluxos que atravessam os contornos da célula são escritos da seguinte forma $-d\left(x \pm \frac{1}{2}h, t\right)u_x\left(x \pm \frac{1}{2}h, t\right)$ onde $d(x, t)$ representa o coeficiente difusivo. A correspondente equação é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(d(x, t) \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) \right). \quad (2)$$

Há também uma variação local em $u(x,t)$ devido a fontes, sumidouros e reações químicas, as quais são descritas por

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = f(x, t, u(x, t)). \quad (3)$$

A variação global na concentração é descrita combinando esses três efeitos, gerando a chamada equação advectiva-difusiva-reativa, dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} (v(x, t)u(x, t)) = \frac{\partial}{\partial x} \left(d(x, t) \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) \right) + f(x, t, u(x, t)). \quad (4)$$

2.2.2. Equações de Navier-Stokes

As equações de Navier-Stokes são um conjunto de equações diferenciais parciais não lineares acopladas que descrevem como a velocidade, pressão e densidade de um fluido em movimento estão relacionada. O termo "acopladas" significa que as equações devem ser resolvidas simultaneamente. Elas foram derivadas independentemente por G.G Stokes, na Inglaterra, e M.Navier, na França, no início de 1800. (Hall, 2015)

O conjunto de equações é formado por quatro equações diferenciais parciais e uma equação de estado. A equação da conservação da massa (também chamada de equação da continuidade), as três equações da conservação da quantidade de movimento (uma para cada eixo de um referencial inercial) e a equação de estado.

A solução destas equações fornece a evolução temporal e espacial da velocidade, pressão e densidade de um fluido em movimento e por este motivo são

fundamentais em diversas áreas da engenharia tais como: aerodinâmica, climatologia, oceanografia, estudo de reatores, combustão, etc.

2.2.3. Equação da Conservação da Massa

Em coordenadas retangulares, a equação da conservação da massa é uma equação diferencial parcial que define a taxa temporal mássica de um volume de controle diferencial, considerando os fluxos que entram e saem deste volume de controle. O livro Fox(p.185, 2006,) faz a dedução desta equação, obtendo

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (5)$$

que pode ser simplificada para

$$\nabla \cdot \vec{V} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (6)$$

O termo do lado esquerda da equação (1) é o divergente do campo de velocidades, e representa a vazão mássica que entra e sai do volume de controle. O termo do lado direito define a taxa temporal de diminuição de massa dentro do volume de controle.

Para escoamentos incompressíveis, a densidade é constante e a equação pode ser reduzida para

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (7)$$

2.2.4. Equação da Conservação da Quantidade de Movimento

As equações da quantidade de movimento de um fluido são um conjunto de equações diferenciais parciais não lineares que descrevem o movimento de partículas fluidas em um domínio contínuo.

A solução destas equações fornecem o campo de velocidades e pressão de um escoamento de fluido. Elas podem ser deduzidas através da aplicação da 2ª lei de Newton para um volume de controle diferencial, considerando as forças atuantes neste volume, como mostrado por Fox (p.212,2006) e são descritas como:

quantidade de movimento em x

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \rho(u \cdot \nabla)u = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu(\nabla^2 u) + f_x \quad (8)$$

quantidade de movimento em y

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \rho(v \cdot \nabla)v = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu(\nabla^2 v) + f_y \quad (9)$$

quantidade de movimento em z

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t} + \rho(w \cdot \nabla)w = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu(\nabla^2 w) + f_z \quad (10)$$

I *II* *III* *IV* *V*

O lado esquerdo da equação representa a aceleração da partícula fluida por unidade de volume (a variação da quantidade de movimento), o lado direito representa as forças que atuam diretamente no volume de controle, responsáveis pela variação da quantidade de movimento. Elas estão escritas por unidade do volume de controle diferencial. O termo μ é a viscosidade dinâmica do fluido, e possui diferentes valores para diferentes tipos de fluidos. Fluidos newtonianos são os que tem viscosidade que pode ser considerada constante.

I representa a taxa de variação de quantidade de movimento pelo tempo para um volume de controle,

II representa a taxa de variação de quantidade de movimento devido ao escoamento do fluido (termo advectivo),

III representa as forças de pressão que atuam no fluido,

IV representa as forças de cisalhamento viscosas que atuam sobre o fluido,

V representa as forças de campo que atuam sobre o fluido, tais como a força gravitacional e a força eletromagnética.

2.2.5. Equação da Conservação de Energia

A equação da conservação da energia define a quantidade de energia que entra, sai ou se transforma em um volume de controle. Ela também é chamada de 1ª lei da termodinâmica, e afirma que energia não pode ser criada nem destruída, mas pode mudar de uma forma para outra, como, por exemplo, energia química, elétrica, cinética, potencial, etc.

Em um sistema reativo multicomponente, existem diversos mecanismos que contribuem para o fluxo total de calor, os mais comumente conhecidos são condução, convecção e radiação. Dois principais efeitos adicionais são encontrados na literatura; os efeitos do trabalho mecânico realizado em um sistema devido a flutuabilidade (forças de empuxo) e o chamado efeito Dufour (o fluxo de energia devido a um gradiente de concentração ocorrendo como um efeito acoplado à processos irreversíveis), em geral, esses efeitos podem ser negligenciados Carlsson(p.23, 1999).

A equação da conservação de energia pode ser escrita em formas diferentes dependendo da variável que é usada como variável dependente. A variável dependente usada neste trabalho será a temperatura, e ela será escrita como:

$$\rho \frac{\partial C_p T}{\partial t} + \rho C_p \vec{V} \cdot (\nabla T) = k(\nabla^2 T) + \dot{S} \quad (11)$$

I *II* *III* *IV*

Nesta equação, k representa a condutividade térmica e C_p representa o calor específico do material.

I representa a taxa de variação de energia pelo tempo,

II representa a taxa de variação de energia devido a advecção,

III representa a taxa de variação de energia devido a condução de calor (difusividade térmica),

IV Representa a fonte ou sumidouro de energia.

2.2.6. Equação do Transporte de Espécies

A equação do transporte de espécies tem forma semelhante a equação da conservação de energia e representa a evolução temporal e espacial do transporte de espécies químicas. Ela pode ser expressa como:

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot (\nabla Y_i) = \rho D(\nabla^2 Y_i) + S_i \quad (12)$$

I *II* *III* *IV*

O índice i indica a i -ésima espécie química, Y é a fração mássica desta espécie e o termo D indica a difusividade do material, a qual varia fortemente com a temperatura, porém, neste trabalho será tratada como uma constante.

I representa a taxa de variação da fração mássica da espécie i pelo tempo,

II representa a taxa de variação da fração mássica da espécie i devido a advecção,

III representa a taxa de variação da fração mássica da espécie i devido a difusão (lei de Fick)

IV Representa a fonte ou sumidouro da fração mássica da espécie i .

Temos também a relação, que indica que a soma das frações mássicas de todos as espécies de um volume de controle deve ser igual a unidade:

$$\sum_{i=1}^n Y_i = 1 \quad (13)$$

2.2.7. Equação de Poisson para a Pressão

A equação de Poisson para a pressão é obtida aplicando o divergente na equação da quantidade de movimento e considerando a hipótese de densidade constante, ou seja, esta equação é válida para fluidos incompressíveis. Ela fornece o campo de pressão de um escoamento e é essencial para a solução das equações de Navier-Stokes. CORNTHWAITE(p.6, 2013).

Aplicando o divergente em (4) e usando a condição de divergência nula de (3) temos

$$\nabla \cdot (u_t + (u \cdot \nabla)u) = \nabla \cdot (\mu \Delta u - \nabla p + f) \quad (14)$$

o termo do lado esquerdo desta equação pode ser simplificado para

$$\nabla \cdot (u_t + (u \cdot \nabla)u) = \frac{\partial(\nabla \cdot u)}{\partial t} + \nabla \cdot (u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot (u \cdot \nabla)u \quad (15)$$

enquanto que o lado direito pode ser simplificado para

$$\nabla \cdot (\mu \nabla^2 u - \nabla p + f = \mu \Delta(\nabla \cdot u) - \Delta p + \nabla \cdot f) = -\nabla^2 p + \nabla \cdot f \quad (16)$$

rearranjando os termos temos

$$\nabla^2 p = \nabla \cdot (f - (u \cdot \nabla)u) \quad (17)$$

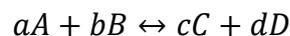
2.2.8. Cinética Química

A teoria da cinética química descreve o estado transitório de um sistema durante um processo de combustão. Basicamente, ela descreve a taxa na qual as espécies químicas são consumidas e criadas e a taxa de calor que é liberado em uma reação.

Na combustão, duas características importantes são observadas. Primeiro, as taxas de reação de uma combustão são fortemente sensíveis a temperatura. Segundo, uma grande quantidade de calor é liberado durante uma reação química. O calor liberado nas reações aumenta a temperatura dos reagentes e faz com que as reações progridam a altas taxas.

A cinética química é uma ciência que descreve as taxas na qual as reações ocorrem, quando acopladas às equações de dinâmica dos fluidos e transferência de calor, caracterizam um sistema de combustão (MCALLISTER, p.53, 2011).

A expressão química de uma reação pode ser descrita pela seguinte expressão geral:



onde as letras minúsculas representam os coeficientes estequiométricos e as maiúsculas representam as moléculas envolvidas na reação. A correspondente taxa de progresso da reação é descrita pela forma empírica:

$$-\frac{d[A]}{dt} = k[A]^n[B]^m \quad (18)$$

a qual diz que a taxa de consumo (ou produção) do elemento A é proporcional a concentração dos reagentes. A constante de proporcionalidade k é chamada taxa de Arrhenius e é fortemente dependente da temperatura, e é expressa por:

$$k = A_o e^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)} \quad (19)$$

onde A_o é o fator pré-exponencial, E_a é a energia de ativação da reação, R é a constante universal dos gases e T a temperatura. O fator pré-exponencial expressa a frequência na qual as moléculas dos reagentes se colidem entre si, a energia de ativação pode ser interpretada como a barreira de energia necessária para quebrar as ligações químicas entre as moléculas durante as colisões, o termo exponencial representa a

probabilidade de sucesso das colisões em gerar os produtos (MCALLISTER,p.53, 2011).

2.3. MÉTODOS NUMÉRICOS

2.3.1. Método das Diferenças Finitas

O método das diferenças finitas é o mais antigo entre as técnicas de discretização para equações diferenciais parciais. A derivação e implementação do método das diferenças finitas são particularmente simples em malhas estruturadas as quais são topologicamente equivalentes a uma grade cartesiana uniforme (FRANCO DE SOUZA, 2014).

Expansões de séries de Taylor são usadas para aproximar todas as derivadas espaciais em termos de u_i e/ou valores da solução em um número de nós vizinhos. Por exemplo, se considerarmos uma malha uniforme unidimensional, o valor das derivadas pode ser aproximado por:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \quad (20)$$

esta equação é uma aproximação de segunda ordem para a primeira derivada de u no ponto i . Uma aproximação de segunda ordem para a segunda derivada da variável u , no nó i é:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x}\right) \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{2} \quad (21)$$

O método das diferenças finitas é um método simples e fácil de implementar, porém não é adequado para malhas não estruturadas pois a solução pode sofrer grandes flutuações e dificultar a convergência. Para malhas não estruturadas, existem outros métodos mais eficazes tais como o método dos volumes finitos e o método dos elementos finitos.

Para garantir a convergência da solução de um EDP (equação diferencial parcial), o processo precisa ser consistente e estável.

Estabilidade é a tendência que quaisquer perturbações (erros de arredondamento) que forem introduzidas na solução das equações algébricas tem de decair. Consistência é a propriedade que diz que à medida que a distância entre os pontos espaciais e

temporais são reduzidos, a aproximação utilizada converge para a Equação Diferencial Parcial (EDP). Se um processo for consistente e estável, então irá convergir para a solução da EDP.

Para verificar a estabilidade de esquemas numéricos, procedimentos foram criados, sendo o mais usado o método de Von Neumann.

$$\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq 1 \quad (22)$$

Entretanto, este método só estabelece condições necessárias para problemas de valor inicial com coeficientes constantes (FRANCO DE SOUZA, 2014).

2.3.2. Método dos Volumes Finitos

A idéia básica da formulação do método dos volumes finitos é de que o domínio de cálculo é dividido em números finitos de volumes de controle de maneira que exista um volume de controle para cada ponto nodal e, desta forma, a equação diferencial pode ser integrada para cada volume de controle.

Métodos interpoladores são usados para expressar a variação de cada quantidade, as quais são necessários para o cálculo das integrais. O resultado são equações discretizadas contendo os valores de cada quantidade para um grupo de pontos nodais.

A equação discretizada obtida desta maneira expressa o princípio conservativo da quantidade para um volume de controle finito, da mesma forma que a equação diferencial faz para um volume de controle infinitesimal.

A característica mais atrativa da formulação de volumes de controle é que a solução resultante implica a conservação integral das quantidades tais como massa, quantidade de movimento, energia e espécies. Desta forma, a conservação é garantida para qualquer grupo de volume de controle e, é claro, para o domínio de cálculo (PATANKAR, 1980).

Para mostrar a aplicação do método, consideramos um simples exemplo da equação da condução unidimensional permanente, escrita como

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T(x)}{\partial x} \right) + S = 0. \quad (23)$$

Onde k é a condutibilidade térmica, T é a temperatura e S é a taxa de geração de calor por unidade de volume. Consideramos o domínio dividindo-o entre volumes de controle como pode ser visualizado pela Figura 4.

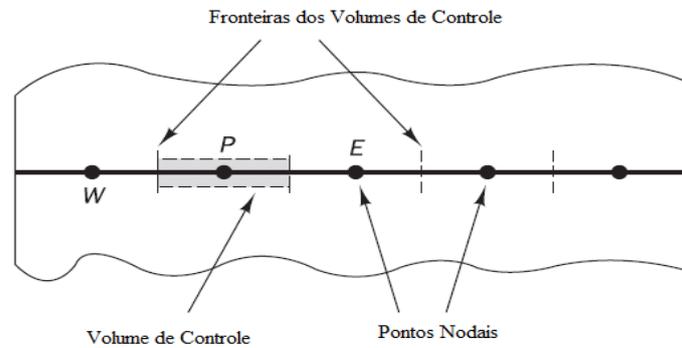


Figura 4: Domínio dividido em volumes de controle e sua Nomenclatura.

Fonte: Veersteg (2007)

integrando a equação acima e considerando a condutibilidade independente de x , temos

$$\iiint_{\Delta V} k \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} T(x) \right) dV + \iiint_{\Delta V} S dV = 0 \quad (24)$$

A equação pode ser reescrita para a aplicação do teorema de Gauss,

$$\iiint_{\Delta V} k \left(\nabla \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x} T(x) \right) \right) dV + \iiint_{\Delta V} S dV = 0 \quad (25)$$

Aplicando o teorema de Gauss

$$k \oint_{\Delta S} \left(\left(\frac{\partial}{\partial x} T(x) \right) \cdot n \right) dS + \iiint_{\Delta V} S dV = 0 \quad (26)$$

Assim, é possível realizar a integração do primeiro e do segundo termo, que nos fornece a seguinte relação

$$\left(kA \frac{dT}{dx} \right)_e - \left(kA \frac{dT}{dx} \right)_w + \hat{S} \Delta V = 0 \quad (27)$$

Onde A é a área de cada fronteira do volume de controle, ΔV é o volume e \hat{S} é o valor médio da fonte. Para calcular os gradientes (e portanto, os fluxos) utiliza-se um método chamado diferenças centrais, o qual utiliza aproximações lineares entre os pontos nodais vizinhos. Esse método é bastante usado para discretização de equações de difusão pois oferece uma precisão de segunda ordem. Temos então,

$$\left(kA \frac{dT}{dx}\right)_e = kA \left(\frac{T_e - T_p}{\Delta x}\right) \quad (28)$$

$$\left(kA \frac{dT}{dx}\right)_w = kA \left(\frac{T_p - T_w}{\Delta x}\right) \quad (29)$$

Substituindo a equação(28) e (29) na equação (27) temos a seguinte equação

$$kA \left(\frac{T_e - T_p}{\Delta x}\right) - kA \left(\frac{T_p - T_w}{\Delta x}\right) + \hat{S}\Delta x = 0 \quad (30)$$

Onde Δx é a distancia entre os pontos nodais. Desta forma, conseguimos transformar equações diferenciais em equações algébricas para cada volume de controle, com apropriadas condições de contorno, essas equações algébricas devem então ser resolvidas simultaneamente para se obter a solução aproximada da equação diferencial.

2.3.3. Método de Newton para Sistema de Equações

Considere um vetor $x \in \mathbb{R}^n$ e uma aplicação $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, escritos na forma vetorial;

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$$

$$F(x) = (f(x)_1, f(x)_2, \dots, f(x)_n)$$

Em geral, estamos interessados em encontrar uma, ou mais, soluções para a seguinte equação.

$$F(x) = \vec{0} \quad (31)$$

Assim como no caso de uma variável, o método de Newton é derivado considerando uma aproximação linear da função F em torno de um ponto conhecido x_0 .

De maneira análoga, consideramos então uma expansão da série de Taylor em torno do vetor x_0 e truncamos os termos de ordem maior que um, temos então

$$F(x) = F(x_0) + J(x_0)(\Delta x) = 0 \quad (32)$$

Onde $J(x_0)$ é conhecido como matriz jacobiana da F aplicada ao vetor x_0 . A equação (32) pode ser reescrita da seguinte forma,

$$J(x_0)(\Delta x) = -F(x_0) \quad (33)$$

Dado que a matriz jacobiano $J(x_0)$ e $F(x_0)$ são conhecidos, temos um sistema de equações lineares que podem ser resolvidos de maneira eficiente e precisa, uma vez que possuímos o vetor solução Δx , obtendo uma melhor aproximação x_1 para a solução dada pela seguinte relação

$$x_1 = x_0 + \Delta x \quad (34)$$

Para os próximos passos, temos o seguinte processo:

- Resolver o sistema linear $J(x_i)(\Delta x) = -F(x_i)$ para Δx
- Fazer $x_{i+1} = x_i + \Delta x$
- Repetir o processo até $\max(|F(x_i)|) \leq \varepsilon$ onde ε é uma tolerância arbitraria.

Assim, o método de Newton consegue romper a dificuldade de resolver um sistema de equações não-lineares acopladas. A vantagem do método é sua convergência quadrática, levando a solução desejada apenas com algumas poucas iterações.

Suas maior desvantagem esta na necessidade de calcular a matriz jacobiana, que, em alguns casos é impossível e do ponto de vista computacional, é dispendioso. Além disso, o método é localmente convergente, ou seja, a estimativa deve estar próxima suficiente da solução para que a convergência ocorra, caso contrario, o método pode apresentar oscilações e até mesmo divergir.

Muitos métodos baseados no método de Newton foram criados para superar tais problemas. Alguns como o método da Secante aproxima as derivadas da matriz jacobiana, enquanto que outros implementam um algoritmo chamado "line search" para tornar o método globalmente convergente.

2.3.4. Método das Linhas

Supomos que temos um problema de valor de contorno com solução dada por $u(x, t)$, discretizamos o espaço em uma certa malha Ω_h com $h > 0$ que nos fornece o sistema semi-discreto de EDO's, escrito como:

$$u'(t) = F(t, u(t)), \quad 0 < t < T, \quad u(0) = u_0 \quad (35)$$

onde $u(t) = (u_j(t))_{j=1}^m \in \mathbb{R}^m$ e $F(t, u(t))$ é uma aplicação resultante de algum método de discretização espacial sobre os termos da equação diferencial parcial, e m é proporcional ao número de pontos da malha no espaço.

De acordo com o Métodos das Linhas, uma solução aproximada escrita como $u_j^n \approx u(x_j, t_n)$ é obtida aplicando algum método numérico para EDO's na eq(definir) com tempo escrito como $t_n = n\tau$, com $n = 1, 2, \dots, T$, onde τ é chamado de passo de tempo.

Como um exemplo para o método numérico para EDO's temos o bem conhecido método θ :

$$u_{n+1} = u_n + \tau(1 - \theta)F(t_n, u_n) + \tau\theta F(t_{n+1}, u_{n+1}). \quad (36)$$

onde $u_n = (u_j^n)_{j=1}^m \in \mathbb{R}^m$ denota o vetor contendo a solução numérica totalmente discretizada no passo de tempo $t = t_n$ e $\theta \in [0, 1]$.

2.3.5. Integração Temporal: Método de Euler Implícito

Considere o problema de valor inicial (PVI), escrito da seguinte forma

$$u'(t) = F(t, u(t)), \quad u(0) = u_0 \quad (37)$$

onde u, F e t foram definidos acima. O método de Euler Implícito computa a aproximação u_{n+1} da seguinte maneira

$$u_{n+1} = u_n + \tau F(t_{n+1}, u_{n+1}) \quad (38)$$

Como pode ser observado por esta equação, F é implícita, e portanto, não é conhecida a priori como seria em métodos explícitos. A desvantagem disto é a necessidade de resolver um sistema de equações lineares o que torna o método computacionalmente mais caro. Se F for não-linear, torna-se necessário ainda a aplicação de algum método de linearização de sistemas de equações não-lineares. Por fim, outra desvantagem do método é sua precisão, que é de ordem um no tempo.

A maior vantagem do método de Euler Implícito é a sua propriedade de estabilidade, o método é incondicionalmente estável para F linear, o que significa que pode ser usado qualquer passo de tempo para a solução das equações difusivas-advectivas-reativas quando a fonte é linear; Por este motivo, este foi o método escolhido para a solução das equações apresentadas neste trabalho.

2.4. MODELO MATEMÁTICO DO ESPALHAMENTO DE CHAMA

2.4.1. Modelo

Inicialmente, um combustível sólido espesso é colocado horizontalmente em um túnel de vento e se encontra em equilíbrio térmico com o fluido que está escoando sobre sua superfície. Uma parte deste sólido é aquecido com uma fonte de calor externa a fim de causar ignição. Segundo Di (Blasi,1989) "a quantidade de calor fornecida deve ser maior do que a quantidade necessária para gerar uma chama auto sustentável, porém suficientemente pequena para não afetar o regime permanente da chama". Um diagrama esquemático pode ser visto na Figura (5).

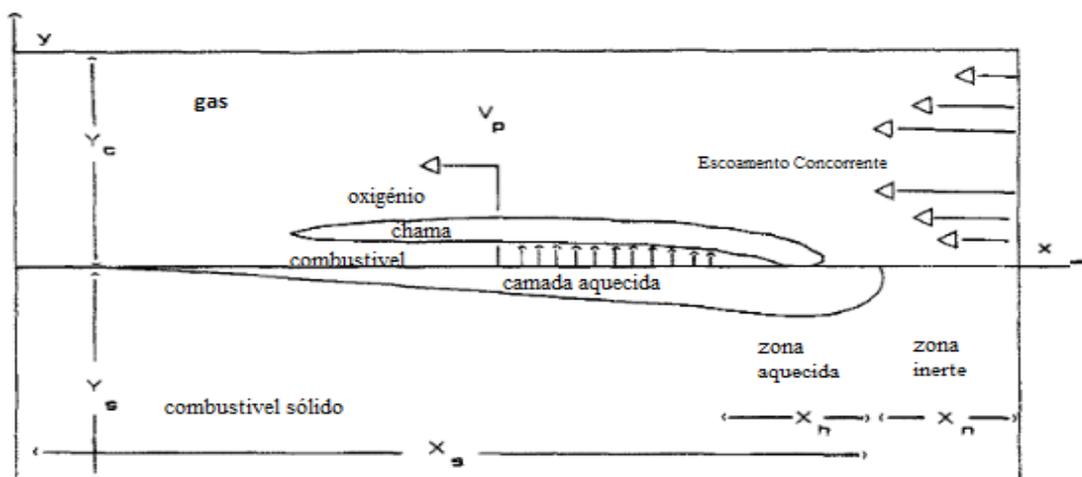


Figura 5: Descrição do Modelo de propagação de chama.

Fonte: Di Blasi (p.483,1989)

2.4.2. Modelo da Fase Sólida

Na modelagem da fase sólida, as seguintes hipóteses são feitas:

- O combustível sólido é termicamente espesso.
- A diminuição da superfície sólida após a passagem dos produtos da pirólise é negligenciado.
- A densidade e as propriedades térmicas do sólido são constantes.
- A ignição é causada por uma fonte de calor constante localizada em uma pequena porção do sólido.
- A pirólise do combustível sólido ocorre apenas na superfície e sua taxa é expressa pela lei de Arrhenius de ordem zero.

Com o uso dessas hipóteses, o modelo matemático da fase sólida se reduz apenas a equação da conservação de energia:

$$\rho_s C_s \frac{\partial T_s}{\partial t} + \rho_s C_s \left(u \frac{\partial T_s}{\partial x} + v \frac{\partial T_s}{\partial y} \right) = k_s \left(\frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_s}{\partial y^2} \right) \quad (39)$$

2.4.3. Modelo da Fase Gasosa

Na modelagem da fase sólida, as seguintes hipóteses são feitas:

- As propriedades do gás são constantes;
- Os efeitos da radiação da fuligem e da chama são negligenciados;
- A combustão da fase gasosa é modelado por uma reação global de um passo e a taxa de reação pela lei de Arrhenius de segunda ordem;
- O Gás é considerado como fluido incompressível.

Com as hipóteses acima, o sistema de equações para a modelagem da fase gasosa são dados por sete equações, duas para os componentes da velocidade, uma para a pressão, uma equação para cada espécie e a equação da conservação de energia.

1. Conservação da quantidade de movimento

$$\rho_g \frac{\partial u}{\partial t} + \rho_g \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + F \quad (40)$$

$$\rho_g \frac{\partial v}{\partial t} + \rho_g \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \quad (41)$$

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = -\rho_g \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \right) \quad (42)$$

2. Conservação das espécies químicas

$$\rho_g \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho_g \left(u \frac{\partial Y_i}{\partial x} + v \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) = w_i + \rho_g D_g \left(\frac{\partial^2 Y_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y_i}{\partial y^2} \right) \quad (43)$$

$$\sum_{i=1}^n Y_i = 1 \quad i=C, O, P \quad (44)$$

$$w_C = -A_g e^{\frac{-E_g}{RT}} Y_C Y_o \rho_g^2 a_C \quad (45)$$

$$w_O = -A_g e^{\frac{-E_g}{RT}} Y_C Y_o \rho_g^2 a_O \left(\frac{M_O}{M_C} \right) \quad (46)$$

$$w_P = A_g e^{\frac{-E_g}{RT}} Y_C Y_o \rho_g^2 a_P \left(\frac{M_P}{M_C} \right) \quad (47)$$

3. Conservação de Energia

$$\rho_g C_p \frac{\partial T_g}{\partial t} + \rho_g C_p \left(u \frac{\partial T_g}{\partial x} + v \frac{\partial T_g}{\partial y} \right) = q + k_g \left(\frac{\partial^2 T_g}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_g}{\partial y^2} \right) \quad (48)$$

$$q = A_g e^{\frac{-E_g}{RT}} Y_C Y_o \rho_g^2 \Delta H \quad (49)$$

2.4.4. Condições Iniciais e de Contorno

As condições iniciais para as equações de Navier-Stokes são $u, v, p=0$ em todo o domínio, e as condições de contorno são:

u, v, p são periódicas em $x=0, 2$

$u, v=0$ em $y=0; 0,5$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0 \text{ em } y = 0; 0,5$$

$F=40$ em todo o domínio

Para a fase gasosa, as condições iniciais são

$$T_g = T_0, \quad Y_c = Y_p = 0, \quad Y_o = Y_{o0}$$

Para a fase sólida

$$T_s = T_0$$

Na entrada do túnel de vento, (lado direito da Figura (5)), as condições de contorno são

$$T_g = T_0, \quad Y_o = Y_{o0}, \quad Y_c = Y_p = 0.$$

Na saída do túnel de vento (lado esquerdo da Figura (5)), as condições são

$$\frac{\partial T_g}{\partial x} = 0, \tag{50}$$

$$\frac{\partial Y_i}{\partial x} = 0 \quad i = P, O, C \tag{51}$$

Na parte de cima do túnel de vento, temos a condição de isolamento térmico

$$\frac{\partial T_g}{\partial y} = 0 \tag{51}$$

Para as espécies químicas, as condições de impermeabilidade

$$\frac{\partial Y_i}{\partial y} = 0 \quad i = P, O, C \tag{52}$$

Na interface sólido-gás, as condições são obtidas a partir das equações de balanço, o fluxo de massa do vapor de combustível devido a difusão e convecção deve ser igual a taxa de pirólise do combustível

$$\rho_g D \frac{\partial Y_c}{\partial y} = \dot{m}(Y_c - 1) \tag{53}$$

O fluxo de massa de oxigênio deve ser igual a taxa de pirólise

$$\rho_g D \frac{\partial Y_O}{\partial y} = \dot{m} Y_O \quad (54)$$

onde o fluxo de massa da pirólise é dado por

$$\dot{m} = A_s \exp\left(-\frac{E_s}{RT}\right) \rho_s \quad (55)$$

A cada instante, a temperatura na interface sólido-gás do sólido deve ser igual a temperatura do gás

$$T_g = T_s \quad (56)$$

Fazendo o balanço de energia na interface, temos a seguinte expressão

$$-k_g \frac{\partial T_g}{\partial y} = -k_s \frac{\partial T_s}{\partial y} + \dot{m} L \quad (57)$$

3. METODOLOGIA

As equações de Navier-Stokes e a equação de Poisson formam um conjunto de equações parabólicas não-lineares e acopladas, as quais foram resolvidas utilizando diferenças finitas para a discretização espacial o método de Euler-Explícito para a integração temporal. Para fornecer o perfil de velocidade que será usado na solução das equações da fase gasosa, as equações são resolvidas até que se obtenha o estado permanente, caracterizado pelo perfil de velocidades parabólico.

O modelo da fase gasosa é descrito por um conjunto de equações diferenciais parciais parabólicas não-lineares e acopladas. Na fase sólida, o balanço de energia resulta em apenas uma equação diferencial parabólica linear. Nas fases sólida e gasosa, as derivadas espaciais foram aproximadas utilizando o método dos volumes finitos, os termos difusivos foram aproximados por diferenças centrais e os advectivos pelo esquema Upwind. Na integração temporal foi utilizado o método de Euler implícito afim de evitar que as concentrações das espécies se tornem negativos.

Para a fase gasosa um tratamento especial foi. Utilizou-se o método da divisão para integrar no tempo separadamente os termos reativos dos termos difusivos e convectivos. Está abordagem foi necessária para evitar que os termos reativos fossem

calculados ao mesmo tempo que as condições de contorno, o que causa divergência da solução ou valores fisicamente irreais.

A discretização da equação da fase sólida nos fornece um sistema de equações algébricas não lineares, pois apesar da equação ser linear, a condição de contorno não é, então, foi necessário a aplicação do método de Newton para sistema de equações de forma que se obteve um sistema de equações lineares.

Da mesma maneira, a discretização das equações da fase gasosa gerou um conjunto de equações algébricas não lineares, onde foi necessário a utilização do método de Newton para se obter um sistema de equações lineares.

A equação de energia, fração mássica de combustível e fração mássica de oxigênio foram resolvidas simultaneamente devido a existência destas variáveis nos termos reativos.

Para lidar com o acoplamento entre a fase sólida e gasosa, o seguinte procedimento foi aplicado:

- 1) A equação da fase sólida é resolvida, equação (39), para fornecer a temperatura (56) e a distribuição do fluxo de massa (53)-(55) na interface solido/gás, necessários para a solução das equações da fase gasosa.
- 2) As equações da fase gasosa são então resolvidas para fornecer o fluxo de calor necessário para a solução da equação da energia da fase sólida.

Um procedimento iterativo repete 1 e 2, para cada passo de tempo, até que se obtenha o nível de convergência desejado para as variáveis computadas.

Foi utilizado uma malha retangular estruturada com diferentes espaçamentos entre os eixos x e y . O passo de tempo foi escolhido de maneira que as espécies não se tornem negativas, visto que os termos reativos são fortemente "rígidos", fazendo com que mesmo com uma abordagem implícita, seja necessário passos de tempo bem pequenos.

Os sistema de equações lineares formam matrizes diagonais amplamente esparsas, as quais foram criadas utilizando a biblioteca "ScyPy.Sparse". Nesta biblioteca também é possível encontrar algoritmos para a solução de sistema de equações lineares, tanto diretos quanto indiretos. Foram testados vários métodos indiretos e diretos da

biblioteca "ScyPy.Sparse" até se encontrar o método mais eficaz, que foi o método direto.

Para um abordagem mais detalhada da metodologia aplicada, será dividido em três tópicos que detalham a discretização, a aplicação dos métodos numéricos e os dados utilizados no trabalho. O primeiro tópico contém informações da malha utilizada e dos dados numéricos utilizados no trabalho. No segundo tópico é mostrado como é feita a discretização das equações de Navier-Stokes e no terceiro é mostrado como foram obtidas as equações discretizadas das fases sólida e gasosa.

3.1. DADOS NUMÉRICOS

Neste tópico são apresentados os dados numéricos necessários para a solução do modelo de espalhamento de chama sobre um combustível sólido. As propriedades do sólido são aquelas típicas para celulose. Os dados para a fase gasosa e para a fase sólida podem ser vistos nas tabelas (1) e (2) respectivamente, os dados referentes a geometria e métodos podem ser vistos na tabela (3).

Tabela 1 – Propriedades da fase gasosa

Nome	Símbolo	Valor	Unidade
Densidade	ρ_g	$1,19 \times 10^{-3}$	g/cm^3
Calor Específico (pressão constante)	C_p	2.40×10^{-1}	$cal/(g K)$
Condutividade Térmica	k_g	$6,16 \times 10^{-5}$	$g/(s m K)$
Peso Molecular (O_2)	M_o	32	g/mol
Peso Molecular (Combustível)	M_C	162	g/mol
Constante do Gás	R	1,9859	$g/(mol K)$
Calor da Combustão	ΔH	4×10^3	cal/g
Temperatura ambiente	T_0	300	K
Energia de ativação	E_g	15×10^3	cal/mol
Fator pré-exponencial	A_g	$3,13 \times 10^{10}$	$cm^3/(g s)$
Fração Mássica de Oxigênio	Y_{O_0}	0.23	–

Fonte: T'ien (1979)

Tabela 2 – Propriedades da fase sólida

Nome	Símbolo	Valor	Unidade
Densidade	ρ_s	$6,5 \times 10^{-1}$	g/cm^3
Calor Específico (pressão constante)	C_s	$3,0 \times 10^{-1}$	$cal/(g K)$
Condutividade Térmica	k_s	$3,0 \times 10^{-4}$	$g/(s m K)$
Calor da Pirólise	L	-180	cal/mol
Condutividade de massa	ρD_g	$4,4 \times 10^{-3}$	$g/(cm s)$
Temperatura ambiente	T_∞	300	K
Energia de ativação	E_s	30×10^3	cal/mol
Fator preexponencial	A_s	2×10^8	$cm^3/(g s)$
Espessura do sólido	δ	2	cm

Fonte: T'ien(1979)

Tabela 3 – Dados para a implementação dos métodos numéricos

Nome	Símbolo	Valor	Unidade
Divisão no eixo x	Δx	90	–
Divisão no eixo y	Δy	60	–
Passo de Tempo	Δt	1×10^{-4}	s
Comprimento do domínio em y	D_s	0,5	cm
Comprimento do domínio em x	L_s	2	cm

Fonte: Autoria Própria

3.2. DISCRETIZAÇÃO: EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES

As equações (18)-(20) foram discretizadas utilizando o método das diferenças finitas e o método de Euler-Explicíto. A equação da quantidade de movimento- u levou a:

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} + u_{i,j}^n \frac{u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n}{\Delta x} + v_{i,j}^n \frac{u_{i,j}^n - u_{i,j-1}^n}{\Delta y} = \frac{1}{\rho} \frac{p_{i+1,j}^n - p_{i-1,j}^n}{\Delta x} + \mu \left(\frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n - u_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) + F_{i,j} \quad (58)$$

a equação da quantidade de movimento- v levou a

$$\frac{v_{i,j}^{n+1} - v_{i,j}^n}{\Delta t} + u_{i,j}^n \frac{v_{i,j}^n - v_{i-1,j}^n}{\Delta x} + v_{i,j}^n \frac{v_{i,j}^n - v_{i,j-1}^n}{\Delta y} = \frac{1}{\rho} \frac{p_{i+1,j}^n - p_{i-1,j}^n}{\Delta x} + \mu \left(\frac{v_{i+1,j}^n - 2v_{i,j}^n - v_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{v_{i,j+1}^n - 2v_{i,j}^n - v_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) \quad (59)$$

e a equação da pressão levou a

$$\begin{aligned} & \frac{p_{i+1,j}^n - 2p_{i,j}^n - p_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{p_{i+1,j}^n - 2p_{i,j}^n - p_{i-1,j}^n}{\Delta y^2} \\ &= \rho \left[\frac{1}{\Delta t} \left(\frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2\Delta x} + \frac{v_{i,j+1}^n - v_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \right) - \frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2\Delta x} \frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2\Delta x} \right. \\ & \quad \left. - 2 \frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2\Delta x} \frac{v_{i,j+1}^n - v_{i,j-1}^n}{2\Delta y} - \frac{v_{i,j+1}^n - v_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \frac{v_{i,j+1}^n - v_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \right] \end{aligned} \quad (60)$$

Para as equações da quantidade de movimento, isolamos os termos do passo de tempo seguinte $n + 1$.

quantidade de movimento- u

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+1} &= u_{i,j}^n - u_{i,j}^n \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n) - v_{i,j}^n \frac{\Delta t}{\Delta y} (u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n) - \frac{\Delta t}{\rho 2\Delta x} (p_{i+1,j}^n - p_{i-1,j}^n) \\ & \quad + \mu \left[\frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n) + \frac{\Delta t}{\Delta y^2} (u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n) \right. \\ & \quad \left. + F_{i,j} \Delta t \right] \end{aligned} \quad (61)$$

quantidade de movimento- v

$$\begin{aligned} v_{i,j}^{n+1} &= v_{i,j}^n - v_{i,j}^n \frac{\Delta t}{\Delta y} (v_{i,j}^n - v_{i-1,j}^n) - u_{i,j}^n \frac{\Delta t}{\Delta x} (v_{i,j}^n - v_{i-1,j}^n) - \frac{\Delta t}{\rho 2\Delta y} (p_{i+1,j}^n - p_{i-1,j}^n) \\ & \quad + \mu \left[\frac{\Delta t}{\Delta x^2} (v_{i+1,j}^n - 2v_{i,j}^n - v_{i-1,j}^n) + \frac{\Delta t}{\Delta y^2} (v_{i+1,j}^n - 2v_{i,j}^n - v_{i-1,j}^n) \right] \end{aligned} \quad (62)$$

Para a pressão, isolamos o termo $p_{i,j}^n$ e iteramos em um pseudo-tempo.

$$\begin{aligned} p_{i,j}^n &= \frac{(p_{i+1,j}^n + p_{i-1,j}^n)\Delta y^2 + (p_{i,j+1}^n + p_{i,j-1}^n)\Delta x^2}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)} - \frac{\rho \Delta x^2 \Delta y^2}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)} \\ & \quad \times \left[\frac{1}{\Delta t} \left(\frac{u_{i+1,j}^n + u_{i-1,j}^n}{2\Delta x} + \frac{v_{i,j+1}^n + v_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \right) - \frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2\Delta x} \frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2\Delta x} \right. \\ & \quad \left. - 2 \frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2\Delta x} \frac{v_{i,j+1}^n - v_{i,j-1}^n}{2\Delta y} - \frac{v_{i,j+1}^n - v_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \frac{v_{i,j+1}^n - v_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \right] \end{aligned} \quad (63)$$

Com as equações devidamente discretizadas, progredimos no tempo até o estado permanente utilizando-se o resultado das equações da quantidade de movimento na equação da pressão, e vice-versa, para cada passo de tempo, até que o campo de velocidades não modifique mais, indicando que o estado permanente foi alcançado.

3.3 MÉTODOS PARA EQUAÇÕES DIFUSIVA-ADVECTIVA-REATIVA

O conjunto de equações que modela a evolução temporal e espacial da fase gasosa são da forma de equações difusivas-advectivas-reativas, portanto, afim de reduzir a quantidade de cálculos e mostrar os métodos numéricos utilizados será estudada uma equação genérica unidimensional que incorpora todos os termos presentes nas equações do modelo de espalhamento de chama.

Consideremos uma malha unidimensional estruturada igualmente espaçada com n divisões, onde Δx é o espaçamento e $x_i = i\Delta x$ com $i = 1, 2, \dots, m$, a equação (4) pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} (v(x, t)u(x, t)) = \frac{\partial}{\partial x} \left(d(x, t) \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) \right) + f(x, t, u(x, t)) \quad (64)$$

Com a hipótese de propriedades constantes, velocidade do escoamento conhecida e isolando o termo transitório, obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = d \left(\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right) - v \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + f(x, t, u(x, t)) \quad (65)$$

Utilizando o método das linhas, podemos realizar a discretização espacial afim de tornar a EDP um conjunto de EDO's para posteriormente realizarmos a integração temporal com um método numérico adequado.

Utilizando o métodos dos volumes finitos, diferenças centrais para o termo difusivo e o esquema Upwind para termo o advectivo, obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = \frac{dA}{\Delta x} (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) - vA(u_i - u_{i-1}) + f(x, t, u_i) \quad (66)$$

podemos denotar os termos do lado direito da equação por

$$F(t, u(t)) = \frac{dA}{\Delta x} (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) - vA(u_i - u_{i-1}) + f(x, t, u_i) \quad (67)$$

reescrevendo a equação (66) temos

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = F(t, u(t))$$

antes de aplicar a integração temporal, utiliza-se do método da divisão para integrar separadamente os termos difusivos e advectivos do termo reativo, assim

$$\frac{\partial}{\partial t} u^*(x, t) = F_1(t, u(t)^*) , \quad t_n < t < t_{n+\frac{1}{2}}, \quad u(t)^* = u(t_n) \quad (68)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u^{**}(x, t) = F_2(t, u(t)^{**}), \quad t_n < t < t_{n+1}, \quad u(t_n)^{**} = u(t_{n+\frac{1}{2}})^* \quad (69)$$

onde F_1 contem os termos difusivos e advectivos, respectivamente

$$F_1(t, u(t)^*) = \frac{dA}{\Delta x} (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) - vA(u_i - u_{i-1}) \quad (70)$$

e F_2 o termo reativo isolado.

$$F_2(t, u(t)^{**}) = f(x, t, u_i^*) \quad (71)$$

A utilização do método da divisão resulta em duas EDO's, onde é necessário a solução da equação (68) para utilizar na solução da equação (69). Utilizando o método do Euler Implícito, integramos as equações (68) e (69) sequencialmente para obter a solução da EDP no tempo $n + 1$, integrando F_1 e F_2 respectivamente, obtemos

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{dA}{\Delta x} (u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}) - vA(u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}) \quad (72)$$

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = f(x, t, u_i^{n+1}) \quad (73)$$

Pode se observar que as equações algébricas resultantes são implícitas e portanto, um método para a solução de sistema de equações é necessário. A equação (72) é linear assim não há a necessidade de uma linearização, desta forma a equação (72) pode ser facilmente resolvida com qualquer método para sistema de equações lineares. A equação (73) não é linear devido ao termo reativo, portanto é necessário a aplicação do método do Newton para sistemas de equações. Para a utilização do método de Newton, devemos deixar a equação no formato da equação (31). Assim temos:

$$u_i^{n+1} - u_i^n - \Delta t f(x, t, u_i^{n+1}) = \vec{0} \quad (74)$$

com $i=1,2,3,\dots,m$ sendo o número de divisões da malha e também, o número de equações. Com o lado esquerdo da equação (74) pode se calcular o jacobiano para a solução do sistema linear descrito pela equação (32) até que a convergência seja garantida.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

O sólido foi aquecido até uma temperatura de 600 K, nesta temperatura a reação de pirólise acontece liberando voláteis que se dispersam na fase gasosa. Quando o vapor de combustível que está sobre a superfície aquecida do sólido alcança a temperatura de 600~650 K, este reage com o oxigênio que está escoando, liberando uma grande quantidade de calor em milésimos de segundos, produzindo produtos de combustão e elevando a temperatura do gás a altíssimas temperaturas.

A temperatura máxima alcançada pelo gás nesta simulação foi de 2327 K, a qual ocorreu quando a reação de combustão foi completa, como pode ser observado pela Figura (6). Esta pode ser considerada a temperatura adiabática da chama, visto que ainda não houve transferências de calor significativas, comparando este valor com o valor encontrado na literatura verificamos um erro de aproximadamente 2%, o que é bastante satisfatório.

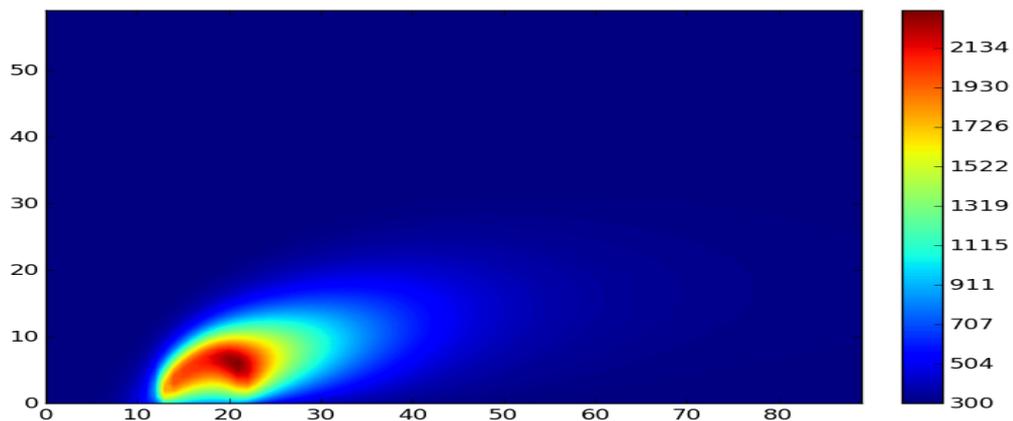


Figura 6: Campo de temperatura em [K], logo após a ignição.

Fonte: Autoria Própria

A energia liberada pela combustão é propagada devido a difusão e advecção do gás, a energia liberada pela combustão se propaga no sólido por condução, mantendo a reação de pirólise e formando uma região denominada região de vaporização.

Nesta região ocorre a vaporização do combustível devido a queima do sólido causado pela energia provida da combustão, a Figura (7), mostra a formação da região de vaporização após a ignição.

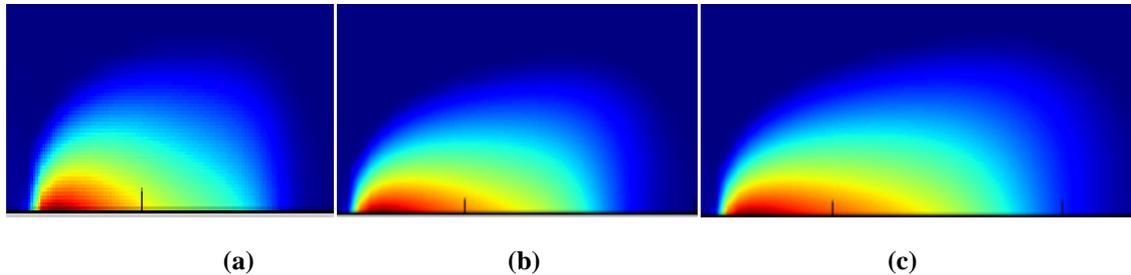


Figura 7: Campos de fração mássica de combustível, (a) logo após a ignição, (b) 0,6 segundos após (a), (c) 1,8 segundos após (a) .

Fonte: Autoria Própria

É possível notar que de (a) para (b) e de (b) para (c) houve um crescimento da região de vaporização. os valores da fração mássica de combustível foram aumentando conforme a degradação do sólido foi aumentando, os valores da fração mássica máxima em (a), (b) e (c) foram respectivamente, 0,26 - 0,34 - 0,37. A temperatura do sólido nesta região varia entre 600~650 [K] com taxa de pirólise variando de 0,0015 a 0,010 [g/cm²-s].

Logo acima da região de vaporização ocorre a região denominada de zona de reação, onde o vapor de combustível se mistura com o oxidante que está escoando, ambos aumentam de temperatura devido ao calor gerado pela combustão anterior, reagem e liberam energia formando um ciclo. A zona de reação pode ser observada na Figura (8), esta é a região onde ocorre a maior temperatura da chama e a maior taxa de reação.

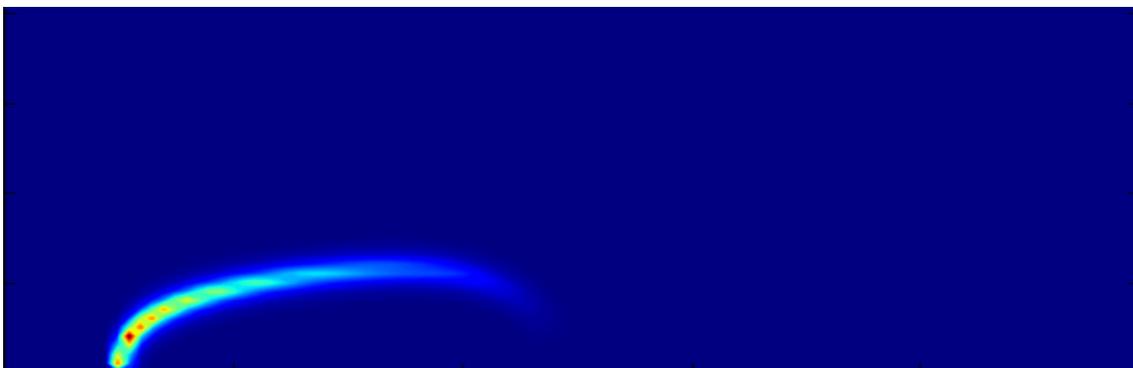


Figura 8: Campo da taxa de reação [g/cm³-s] da fase gasosa.

Fonte: Autoria Própria

É possível notar pela Figura (8) que a maior taxa de reação ocorre muito próxima da superfície do sólido onde a fração mássica de combustível é alta devido a alta taxa de pirólise na região de vaporização.

Nota-se que não há reação na região de vaporização devido a ausência de oxigênio nesta região, pois o ar que escoava do ambiente é totalmente queimado na zona de reação. O maior valor da taxa de reação computado durante a simulação foi de aproximadamente 0,09, variando entre 0,07-0,009. A taxa máxima de reação ocorre acima da região de vaporização do combustível, fora desta região a taxa de reação é pequena e ocorre devido a presença do vapor de combustível carregado pelo escoamento.

A estrutura detalhada da chama já formada pode ser vista na Figura (9), os contornos mostram a forma característica associada a uma chama difusiva imposta a um escoamento concorrente. O campo de temperaturas da chama mostra um valor máximo e as frações mássicas de combustível e oxigênio um valor mínimo na zona de reação, onde as maiores taxas de reação ocorrem, como pode ser visto na Figuras (10) e (11).

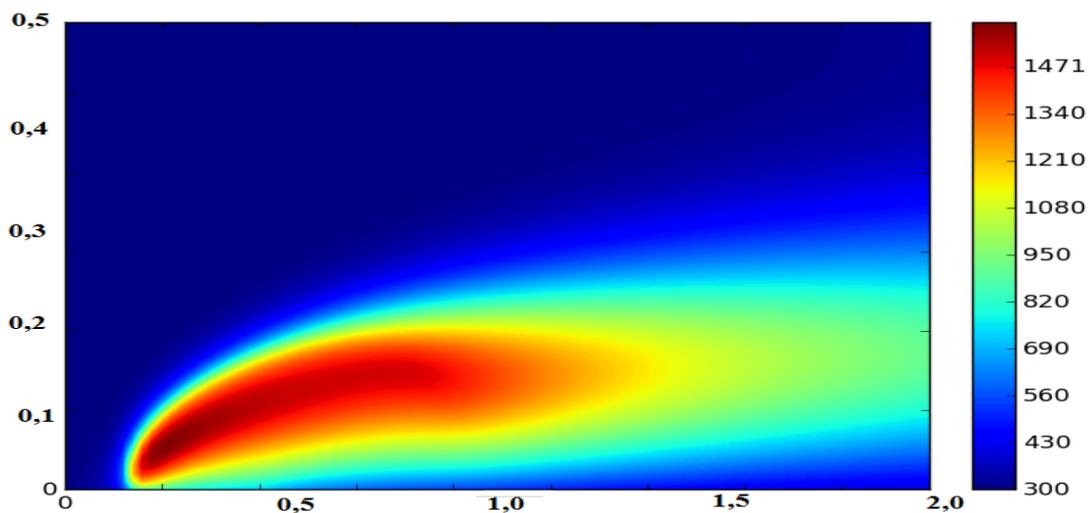


Figura 9: Campo de temperatura [K] da fase gasosa, $U_{max}=60 \text{ cm/s}$, $t=6s$.

Fonte: Autoria Própria

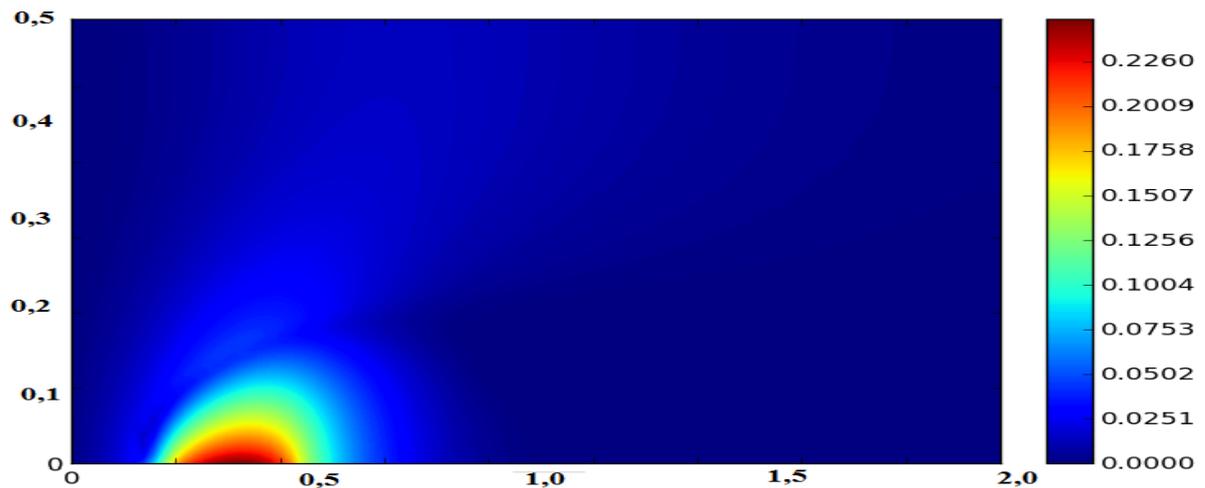


Figura 10: Campo de fração mássica de combustível da fase gasosa, $U_{max}=60 \text{ cm/s}$, $t=6s$.

Fonte: Autoria Própria

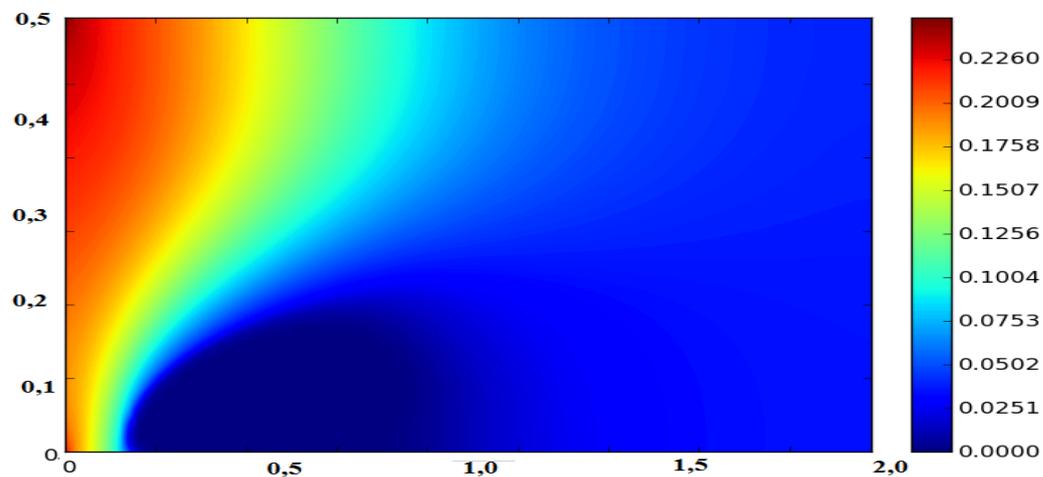


Figura 11: Campo de fração mássica de oxigênio da fase gasosa, $U_{max}=60 \text{ cm/s}$, $t=6s$.

Fonte: Autoria Própria

A chama atinge uma temperatura máxima logo após a ignição, dada pela temperatura de chama adiabática, porém esta temperatura não se mantém devido aos processos de transferência de calor, a temperatura vai lentamente reduzindo até atingir um intervalo permanente de valores que vão de 1500 a 1650 [K].

De $0,4 < x < 0,9 \text{ cm}$ identificamos a região conhecida como pluma de combustão, onde apesar da taxa de pirólise ser desprezível, o vapor de combustível carregado da região de vaporização pelo escoamento externo reage liberando calor, este calor fornece altos valores de fluxo de calor para a região não queimada do sólido, aumentando a temperatura da superfície do sólido, que varia entre valores de 650 a 400 [K] como pode ser observado pela Figura (12).

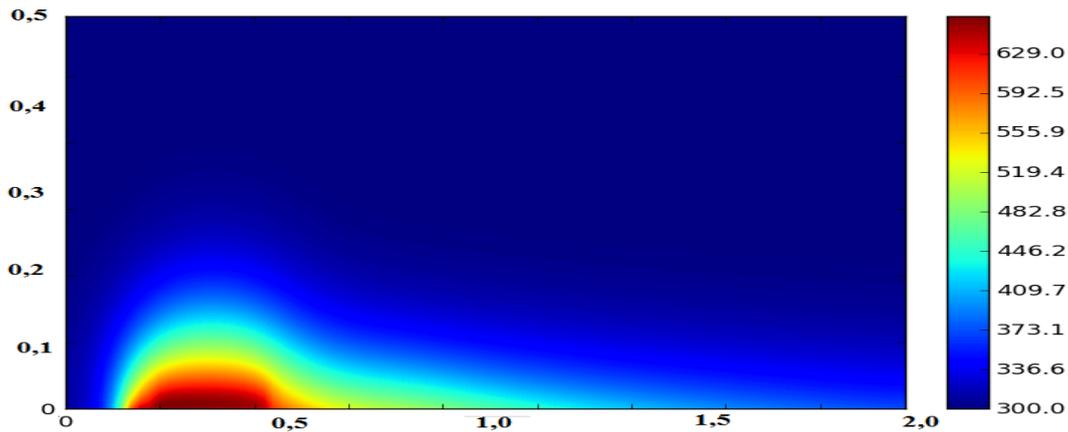


Figura 12: Campo de temperatura do sólido, $U_{max}=60 \text{ cm/s}$, $t=6s$.

Fonte: Autoria Própria

Por fim, em $x > 0,9 \text{ cm}$ temos a região denominada de pluma térmica, onde a taxa de reação é zero devido a ausência de vapor de combustível, nesta região as espécies presentes são somente os produtos de combustão e os oxidantes que se encontram em temperaturas elevadas.

As Figuras (13), (14) e (15) mostram respectivamente, a temperatura da superfície do sólido, a taxa de calor na superfície e o fluxo de massa da pirólise para diferentes valores de tempos.

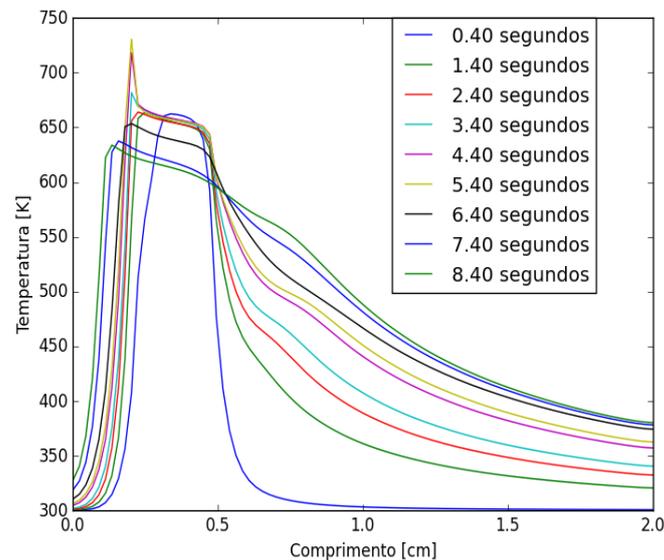


Figura 13: Temperatura da superfície do sólido para diferentes tempos.

Fonte: Autoria Própria

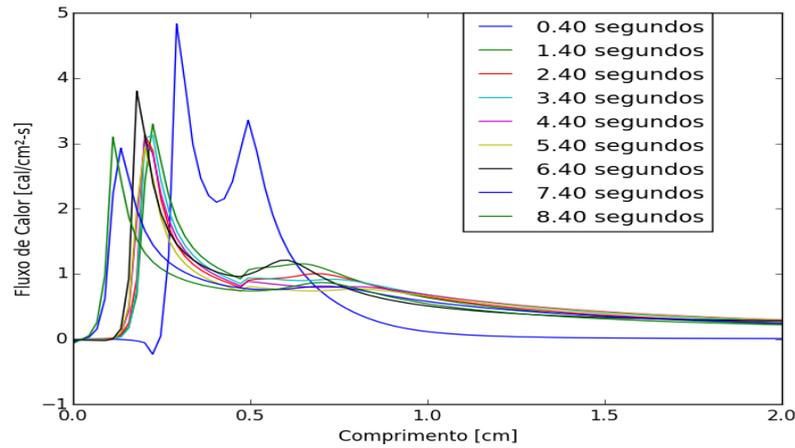


Figura 14: Fluxo de calor sobre a superfície do sólido, $U_{max}=60$ cm/s.

Fonte: A autoria Própria

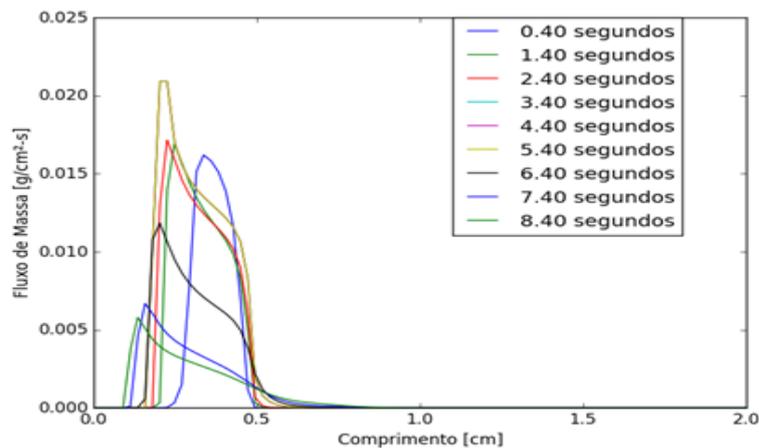


Figura 15: Fluxo de massa devido a reação de pirólise, $U_{max}=60$ cm/s.

Fonte: A autoria Própria

Pelos gráficos, nota-se que os valores máximos do fluxo de pirólise ocorrem sempre na borda da chama, região onde a temperatura do sólido é máxima e conseqüentemente o fluxo de calor. Apesar do sólido ser aquecido em regiões não queimadas, não houve tempo suficiente para que ocorresse a pirólise nessas regiões como se pode observar pela Figura (15), o fluxo de massa ocorre somente na região de vaporização sem se estender para outras regiões do sólido.

Observa-se que o fluxo de calor decai rapidamente quando sai da borda da chama e levemente sobe em aproximadamente $x=0,65$ cm, após subir cai novamente até um valor quase constante que se estende por todo comprimento do sólido. Também é possível observar pela Figura (13) que conforme o tempo passa, a temperatura das

regiões onde a reação de pirólise é desprezível aumenta, chegando a valores próximos de 600 [K], temperatura na qual a reação de pirólise é ativada, caracterizando o processo de espalhamento de chama.

5. CONCLUSÕES

Um modelo já existente de espalhamento de chama foi resolvido utilizando um método implícito. Apesar de ser o mesmo modelo, foi utilizado um número de Lewis muito menor que a unidade, gerando algumas diferenças dos resultados encontrados por Di Blasi;

Os campos de temperatura da fase gasosa e de fração mássica de combustível ficaram muito menores do que os valores obtidos por Di Blasi, isto pode ter ocorrido devido ao número de Lewis ser muito menor que a unidade, o qual foi usado no trabalho de Di Blasi;

Apesar de número de Lewis menor, foi possível detectar as mesmas regiões de integração tais como: região de vaporização, zona de reação, uma pequena pluma de combustão e pluma térmica;

A pluma de combustão é quase inexistente, visto que a difusão de massa ocorre rapidamente, o combustível não consegue ser carregado para fora da região de vaporização pela corrente convectiva;

Em aproximadamente 8 segundos de simulação, a chama não foi capaz de estender a região de vaporização pelo aquecimento do sólido, porém foi possível verificar o processo onde a chama carrega energia para regiões não queimadas do sólido aumentando sua temperatura.

REFERENCIAS

- [1] Zhao.X, T'ien. J.S, **A three-dimensional transient model for flame growth and extinction in concurrent flows**, *Combustion Flame* 162, Cleveland, 2014, p.1D, 29 dez 2014
- [2] Tseng.Y, T'ien.J.S, **A comparison of Flame Spread Characteristics over Solids in Concurrent Flow Using Two Different Pyrolysis Model**, *Journal of Combustion*, Cleveland, 2011, p.2D, 24 Feb.2011
- [3] Rein, G. From Pyrolysis Kinetics to Models of Condense-Phase Burning. **Recent Advances in Flame Retardancy of Polymeric Materials, Vol.19**. M. Lewin(ed), 2008
- [4] Di Blasi. C. **Influences of Sample Thickness on the Early Transient Stages of Concurrent Flame Spread and Solid Burning**, *Fire Safety Journal* 25 (1995), Napoli, Italy. 287-304, 5 jan. 1996
- [5] Di Blasi.C, **NUMERICAL MODELLING OF FLOW ASSISTED FLAME SPREAD**, *COMPUTER METHODS IN APPLIED MECHANICS AND ENGINEERING* 75(1989), Napoli, Italy. p.481-492, 1989.
- [6] Wichman.I, **THEORY OF OPPOSED-FLOW FLAME SPREAD**, *PROG.ENERGY.COMBUST.SCI.*1992.VOL.18, p 553-593, Michigan, 1992
- [7] DE RIS.J.N, **SPREAD OF A LAMINAR DIFFUSION FLAME**, Washington, D.C.
- [8] Carlsson. J, **Fire Modelling Using CFD-An introduction for Fire Safety Engineers**, Lund, 1999.
- [9] Di Blasi. C, **MODELING AND SIMULATION OF COMBUSTION PROCESSES OF CHARRING AND NON-CHARRING SOLID FUELS**, *Prog. Energy Combust.Sci.* 1993, Vol. 19, p.71-104.1993.
- [10] McAllister. S, Chen. J, Fernandez-Pello. A.C, **Fundamentals of Combustion**, Springer, 2011, p.297.
- [11] FOX. R.W, McDONALD.A.T, PRITCHARD.P.J, **INTRODUÇÃO À MECÂNICA DOS FLUIDOS**. SEXTA EDIÇÃO, LTC editora, 2006.
- [12] Disponível em <<https://www.grc.nasa.gov/www/k-12/airplane/nseqs.html>> acesso: 25 mai 2016.
- [13] CORNTHWAITE.J.P, **PRESSURE POISSON METHOD FOR THE INCOMPRESSIBLE NAVIER-STOKES EQUATIONS USING GALERKIN FINITE ELEMENTS**, Georgia, 2013.

[14] Disponível em < <http://www.icmc.usp.br/~lefraso/disc/aula7.pdf>> acesso: 4 jun 2016

[15] Hundsdorfer; Verwer. **Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations (Springer Series in Computational Mathematics).**

[16] Disponível em:

<http://ocw.usu.edu/Civil_and_Environmental_Engineering/Numerical_Methods_in_Civil_Engineering/NonLinearEquationsMatlab.pdf> acesso: 05 jun 2017

[17] Disponível em:

<<http://www.ewp.rpi.edu/hartford/~ernesto/F2012/CFD/Readings/Patankar-NHTFF-1980.pdf>> acesso: 14 mai 2017.

[18] VERSTEEG, H.K. AND MALALASEKERA, **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**, Second Edition, Prentice Hall, England, 2007.

[19] PATANKAR, S.V., **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**, Hemisphere Publishing Corporation, New York, 1980

[20] Disponível em:

<http://nbviewer.jupyter.org/github/barbagroup/CFDPython/blob/master/lessons/16_Step_12.ipynb> acesso: 05 jan 2017