

ESTUDO DA ACELERAÇÃO DE UMA CHAMA NUM CANAL COM OBSTÁCULOS USANDO UMA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE ESCALAR

Eduardo Hwang

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Nuclear.

Orientador: Su Jian

Rio de Janeiro Setembro de 2015

ESTUDO DA ACELERAÇÃO DE UMA CHAMA NUM CANAL COM OBSTÁCULOS USANDO UMA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE ESCALAR

Eduardo Hwang

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Examinada por:

Prof. Su Jian, D.Sc.

Prof. Antonio Carlos Marques Alvim, Ph.D.

Prof. Maria de Lourdes Moreira, D.Sc.

Prof. Luis Fernando Figueira da Silva, D.Sc.

Prof. Leonardo Santos de Brito Alves, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL SETEMBRO DE 2015

Hwang, Eduardo

Estudo da aceleração de uma chama num canal com obstáculos usando uma equação de transporte escalar/Eduardo Hwang. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2015.

XIX, 117 p.: il.; 29, 7cm.

Orientador: Su Jian

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Nuclear, 2015.

Referências Bibliográficas: p. 109 – 117.

1. deflagração.
 2. detonação.
 3. explosão.
 4. hidrogênio.
 5. aceleração de chama.
 6. choque.
 7. compressível.
 8. simulação numérica.
 I. Su Jian.
 II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE,
 Programa de Engenharia Nuclear.
 III. Título.

"Es gibt Männer, die kämpfen für einen Tag und sind gut, andere kämpfen ein Jahr und sind besser und es gibt jene, die viele Jahre kämpfen und sehr gut sind, aber die, die ihr ganzes Leben lang kämpfen, dass sind diejenigen, die unersetzbar sind."

"Há homens que lutam um dia, e são bons; Há outros que lutam um ano, e são melhores; Há aqueles que lutam muitos anos, e são muito bons; Porém há os que lutam toda a vida; Estes são os imprescindíveis."

B.Brecht.

Dedico este trabalho a Li Hwa e Rong, meus queridos pais, que me criaram com fibra e inteligência, e me ensinaram Integridade, Lealdade e Determinação. Que suas lições jamais sejam esquecidas, através de nossas gerações.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer:

Ao meu querido filho Brandon, que confere significado a minha existência, por me tornar uma pessoa melhor e me ajudar a superar qualquer desafio.

Ao Professor Su Jian, meu orientador, por manter minha disciplina e ampliar meu horizonte.

A Rafael Cordilha Komatsu, Marcus Vinícius Monteiro Marques Luiz e Felipe Porto Ribeiro, por me ajudarem a executar as simulações desta tese.

À PETROBRAS, por permitir me desenvolver este trabalho.

Aos meus orientadores no início da vida acadêmica, professores Fábio Saltara e Júlio Romano Meneghini.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

ESTUDO DA ACELERAÇÃO DE UMA CHAMA NUM CANAL COM OBSTÁCULOS USANDO UMA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE ESCALAR

Eduardo Hwang

Setembro/2015

Orientador: Su Jian

Programa: Engenharia Nuclear

A aceleração de chama é um problema físico de grande importância na segurança nuclear, devido à possibilidade de geração de gás hidrogênio a partir da oxidação do Zircônio dos elementos combustíveis, pelo vapor d'água a alta temperatura. O amplo intervalo de concentrações em que o hidrogênio é inflamável, e o fato de que mesmo ignições de baixa energia representam perigo, tornam seu estudo necessário a todas as plantas nucleares resfriadas a água. As diferentes abordagens para tratar deste problema e os principais experimentos de referência são apresentados. O trabalho consiste na proposição e validação de um modelo de combustão numérica, contendo um termo adicional devido à expansão dos gases, obedecendo à invariância galileana e formulado a partir de equações fundamentais. O modelo é simulado para a propagação de chama a altas velocidades, num túnel fechado e obstruído por obstáculos regularmente espaçados; e seu desempenho comparado ao experimento de referência e a dois modelos clássicos de combustão: o modelo de chama coerente, com o transporte da densidade de superfície de chama; e o de velocidade de chama turbulenta, com a utilização da correlação de Peters para determinação da velocidade de propagação. A influência do nível de discretização sobre a taxa de queima, a interferência e o amortecimento de ondas de pressão são analizados. A capacidade de predizer a velocidade de chama e elevações de pressão é requerida para projetar contenções e sistemas de segurança mais eficazes. Neste contexto, um modelo computacionalmente leve torna viável o cálculo de engenharia para uma lista de cenários acidentais, em compartimentos de grande volume, nos quais cursos longos e largos permitem a ocorrência da aceleração da chama até a transição deflagração-detonação.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

STUDY OF ACCELERATION OF A FLAME IN A CHANNEL WITH OBSTACLES USING ONE SCALAR TRANSPORT EQUATION

Eduardo Hwang

September/2015

Advisor: Su Jian

Department: Nuclear Engineering

Flame acceleration is a physical problem of great importance in nuclear safety, due to the possibility of generating hydrogen gas from oxidation of fuel elements' Zirconium, by high temperature steam. The broad concentration interval for hydrogen flammability, plus the fact that even low-energy ignitions pose a threat, make this study necessary to all water-cooled nuclear plants. The different approaches to tackle the problem and main reference experiments are presented. The work consists in proposing and validating a numerical combustion model, containing an additional term due to gas expansion, obeying galilean invariance and formulated from fundamental equations. The model is simulated for high-speed flame propagation, in a closed tunnel obstructed by regularly spaced obstacles; and its performance is compared to the reference experiment and two classical combustion models: the coherent flame model, with transport of flame surface density; and turbulent burning velocity, with utilization of the Peters' correlation to determine propagation speed. The discretization level influence on the burning rate, the pressure wave interference and damping are analyzed. The capability to predict flame speed and pressure elevations is required to design more effective containments and safety systems. In this context, a computationally light model enables the engineering calculation for a list of accident scenarios, within large volume compartments, where long and wide courses allow occurrence of flame acceleration up to deflagration-to-detonation transition.

Sumário

Li	sta d	e Figuras	x	
Li	sta d	e Tabelas	xiii	
1	Introdução			
	1.1	Presença do hidrogênio nas instalações nucleares	2	
	1.2	Organização do trabalho	6	
2	\mathbf{Rev}	isão Bibliográfica	8	
	2.1	Combustão pré-misturada	10	
	2.2	Modelo de taxa de queima limitada por mistura turbulenta	12	
	2.3	Modelo de Bray-Moss-Libby	13	
	2.4	Modelo de chama coerente	15	
	2.5	Modelo da advecção de campo escalar e a velocidade de chama tur-		
		bulenta	17	
	2.6	Correlações para a velocidade de chama turbulenta	20	
	2.7	Comparação dos modelos clássicos da combustão pré-misturada	24	
	2.8	Experimentos no <i>Kurchatov Institute</i> , e o desenvolvimento de modelos		
		para a detonação em larga escala	27	
	2.9	Aplicações da combustão computacional na engenharia de segurança		
		nuclear	30	
	2.10	Desempenho dos modelos clássicos de combustão turbulenta	32	
	2.11	Experimentos de aceleração de chama de média escala em túneis obs-		
		truídos	37	
3	Mod	lelo de combustão modificado	44	
	3.1	Invariância galileana: a distinção entre velocidade da chama e a ve-		
		locidade do fluido	44	
	3.2	Pistonamento: influência da expansão dos gases na equação da		
		variável de progresso	45	
	3.3	Equação da energia e a equação para pressão	49	

	3.4	4 Limite do modelo proposto no regime permanente unidimensional e					
		incompressível					
	3.5	Aproximação do termo divergente por uma forma advectiva 5					
	3.6 Conjunto de equações do escoamento médio e modelo de turb						
		a duas equações, FANS					
		3.6.1 Definição da média de Favre					
		3.6.2 Conservação das espécies químicas e continuidade					
		3.6.3 Quantidade de movimento e tensor de tensões					
		3.6.4 Equação de estado					
		3.6.5 Energia					
		3.6.6 Modelo de turbulência					
		3.6.7 Variável de progresso					
	3.7	Problema canônico aerodinâmico					
	3.8	Modelagem numérica de um túnel de seção prismática com inter-					
		posição de obstáculos					
	3.9	Discretização e verificação numérica					
4	Res	ultados e Discussão 72					
	4.1	Modelo de chama coerente					
	4.2	Modelo de velocidade de chama com a correlação de Peters 80					
	4.3	Modelo proposto					
	4.4	Comparação dos modelos simulados					
5	Cor	nclusões e Sugestões 105					
	5.1	Conclusões					
	5.2	Sugestões para Trabalhos Futuros					
R	eferê	ncias Bibliográficas 109					

Lista de Figuras

1.1	Elemento combustível de uma planta PWR, Uetsuka et al. (2007). $\ .$.	3
2.1	Diagrama de Borghi para combustão pré-misturada, baseado no dia-	
	grama utilizado por Ciccarelli e Dorofeev (2008) $\ldots \ldots \ldots \ldots$	11
2.2	Diagrama de Borghi para combustão pré-misturada, baseado no dia-	
	grama utilizado por Peters (1999) e Pitsch et al. (2002) $\ldots \ldots \ldots$	18
2.3	Dados suavizados, para $S_{\scriptscriptstyle T}/S_{\scriptscriptstyle L}$ contra $v'/S_{\scriptscriptstyle L}$ para diferentes taxas de	
	estiramento, reproduzido de Bradley et al.(1992)	22
2.4	Esquemático do RUT, no Kurchatov Institute	27
2.5	Esquemático do efeito da razão de bloqueio de área BR na área total	
	da chama	38
2.6	Velocidades de deslocamento de chama versus distância percorrida,	
	Ciccarelli et al. (2010)	39
2.7	Contornos da variável de progresso c na simulação de Johansen e	
	Ciccarelli (2013), utilizando modelo de chama coerente (transporte	
	da densidade de superfície) e resolução de grandes escalas	40
2.8	Velocidade de deslocamento de chama versus distância percorrida,	
	Kessler et al. (2010)	41
2.9	Velocidades de deslocamento de chama versus distância percorrida,	
	Kuznetsov et al.(2002)	42
3.1	Forward Facing Step, contornos do número de Mach	62
3.2	Forward Facing Step, contornos da densidade	62
3.3	Forward Facing Step, contornos da pressão	63
3.4	Forward Facing Step, contornos da temperatura	63
3.5	Esquemático do canal com obstáculos	64
3.6	Domínio computacional, malha estruturada com nível de discre-	
	tização x2 \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	67
3.7	Tempo de chegada da chama a pontos de monitoramento, para três	
	níveis de discretização espacial.	68

3.8 3.9	Velocidade de deslocamento da chama, para três níveis de discre- tização espacial, calculada a partir de diferenças divididas Tempo de chegada da chama a pontos de monitoramento, para três	68
	níveis de discretização espacial, com sincronização/alinhamento no primeiro ponto.	70
3.10	Tempo para elevação da pressão até 1 bar nos pontos de monitora- mento, para $1^a e 2^a$ ordem de precisão na integração no tempo	71
4.1	Isosuperfície de indicador de choque unitário do modelo de chama coerente	74
4.2	Isosuperfície de temperatura 1250 K do modelo de chama coerente	74
4.3	Contornos de pressão da simulação usando o modelo de chama coe-	• •
44	rente de Boger et al.(1998)	75
1.1	(ECFM), com densidade inicial de superfície de chama $\Sigma = 2,5 \ m^2/m^3$.	77
4.5	Contornos de temperatura, fração mássica de metano e energia	
	cinética turbulenta; modelo de chama coerente (ECFM), com den-	
	sidade inicial de superfície de chama $\Sigma = 2,5 m^2/m^3$	78
4.6	Contornos de número de Mach e magnitude da velocidade; modelo	
	de chama coerente (ECFM), com densidade inicial de superfície de	
	chama $\Sigma = 2,5 m^2/m^3$	79
4.7	Isosuperfície de temperatura 1250 K do modelo de velocidade de	
	chama turbulenta com correlação de Peters	80
4.8	Curvas de aceleração de chama: correlação de Peters (1999) e expe	
	rimento de Ciccarelli et al.(2010)	81
4.9	Contornos de pressão da simulação usando o modelo de velocidade de	
	chama turbulenta com a correlação de Peters (1999). \ldots	82
4.10	Contornos de pressão e densidade; modelo de velocidade de chama	
	turbulenta com correlação de Peters	83
4.11	Contornos de temperatura, fração mássica de metano e energia	
	cinética turbulenta; modelo de velocidade de chama turbulenta com	
	correlação de Peters.	84
4.12	Contornos de número de Mach e magnitude da velocidade; modelo	
	de velocidade de chama turbulenta com correlação de Peters	85
4.13	Curvas de aceleração de chama: influência da variação do parâmetro	
	$n, \alpha = 0$	86
4.14	Contornos de pressão e comparação das razões de aspecto das frentes	
	de chama	87

4.15	Iso superfície de temperatura 1250 ${\cal K}$ do modelo proposto de veloci-
	dade de chama turbulenta 88
4.16	Curvas de aceleração de chama: influência da variação do parâmetro
	$n, \alpha = 0,035\ldots \ldots $
4.17	Curvas de aceleração de chama: influência da variação do parâmetro
	$n, \alpha = 0,07$
4.18	Curvas de aceleração de chama: influência da variação do parâmetro
	$n, \alpha = 0, 105 \dots \dots$
4.19	Curvas de aceleração de chama: influência da variação do parâmetro
	$n, \alpha = 0, 14 \dots $
4.20	Curvas de aceleração de chama, para $\alpha=0,14$ e $n=16,$ para dois
	conjuntos de pontos de monitoramento
4.21	Contornos de pressão da simulação usando o modelo proposto, pisto-
	namento $\alpha = 0, 14$ e turbulência $n = 16. \dots \dots$
4.22	Contornos de pressão da simulação e três superfícies de vorticidade
	constante, usando o modelo proposto, pistonamento $\alpha=0,14$ e tur-
	bulência $n = 1693$
4.23	Curvas de pressão no tempo, para três pontos de medição no experi-
	mento de experimento de Ciccarelli et al.(2010)
4.24	Curvas de pressão no tempo, para quatro sensores localizados ao final
	do túnel
4.25	Contornos de pressão e densidade; modelo proposto de velocidade de
	chama turbulenta, com $\alpha = 0, 14$ e $n = 16. \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots 96$
4.26	Contornos de temperatura, fração mássica de metano e energia
	cinética turbulenta; modelo proposto de velocidade de chama tur-
	bulenta, com $\alpha = 0, 14$ e $n = 16. \dots 97$
4.27	Contornos de número de Mach e magnitude da velocidade; modelo
	proposto de velocidade de chama turbulenta, com $\alpha = 0, 14$ e $n = 16$. 98
4.28	Contornos de fração mássica e energia cinética turbulenta 101
4.29	Velocidades de deslocamento de chama versus distância percorrida,
	com razão de bloqueio de área (BR) 0,33, Ciccarelli et al. (2010). A
	curva verde mostra as oscilações da velocidade, inferida através de
	fotografia de alta velocidade
4.30	Pressões máximas registradas nos pontos de monitoramento, para três
	modelos de velocidade de chama

Lista de Tabelas

1.1	Ordens de grandeza de massas de zircônio e carbeto de boro para	
	plantas PWR, WWER e BWR, Abou-Rjeily et al.(2011)	4
1.2	Hidrogênio produzido, considerando 100% de oxidação de $Zr,$ Abou-	
	Rjeily et al. (2011)	4
1.3	Hidrogênio gerado pela oxidação de B_4C , Abou-Rjeily et al.(2011)	4
1.4	Inflamabilidade de misturas Ar-hidrogênio, em condições ambiente	
	(0.1MPa, 25 Celsius), Abou-Rjeily et al. (2011) $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	5
4.1	Valores extremos de pressão, velocidade e número de Mach, para	
	simulações selecionadas	04

Lista de Abreviações

AMR Adaptive Mesh Refinement

BVM, TFC Burning Velocity Model ou Turbulent Flame Closure

BWR Boiling Water Reactor

CPM Coarse Particle Method

DDT Deflagration-to-Detonation Transition

EBU, EDC Eddy Break Up, Eddy Dissipation Concept

ECFM, CFM (Extended) Coherent Flame Model

EPR European Pressurized Reactor

FANS/RANS Favre/Reynolds Averaged Navier-Stokes

FTT Fully Threaded Tree Algorithms

LES Large Eddy Simulation

PWR Pressurized Water Reactor

SWACER Shockwave Amplification by Coherent Energy Release

VVER (WWER) Vodo-Vodyanoi Energetichesky Reaktor (Water-Water Energetic Reactor)

Lista de Símbolos

- A Área da superfície de chama, referida a um volume de controle
- ${\cal A}_r$ coeficiente pré-exponencial da lei de Arrhenius, para a reação-r
- c variável de progresso da combustão pré-misturada
- $c^q_{_{\!P}}\,$ calor específico a pressão constante, da espécie química q
- c_m temperatura reduzida
- D difusividade molecular
- Da Número de Damköhler
- ${\cal D}^q\,$ difusividade molecular da espécie química q, nas demais espécies do meio
- $D_{\scriptscriptstyle T}\,$ difusividade turbulenta para variável de progresso e espécies (Número de Lewis unitário)
- e_0 energia total, interna mais cinética
- $E_r\,$ energia de ativação da reação-r
- $f^q_i\,$ força de campo sobre a espécie q, na direção i
- ${\cal G}\,$ campo escalar da Equação-G
 cinemática
- $G^{\prime\prime}\,$ variância do escalar $G\,$
- $h^q\,$ entalpia da espécie q
- $h^q_{f,0}\,$ entalpia de formação da espécie química q
- k energia cinética turbulenta
- k condutividade térmica molecular
- Ka Número de Karlovitz (Fator de estiramento de Karlovitz)
- $k_{\scriptscriptstyle T}\,$ condutividade térmica turbulenta

- $k_{f,r}$ coeficiente cinético da reação-r direta
- $k_{b,r}$ coeficiente cinético da reação-r reversa
- $K_{eq,r}$ constante de equilíbrio químico da reação-r
- Le Número de Lewis
- $l_t\,$ escala de comprimento dissipativa da turbulência
- $L_{\scriptscriptstyle T}\,$ escala de comprimento integral da turbulência
- $l_m\,$ comprimento de Markstein, relacionado à difusão diferencial por curvatura
- M^q Identificação da espécie química q
- n_i versor normal à superfície de chama, componente na direção i
- p pressão
- P_k termo de produção de energia cinética turbulenta
- q''_i fluxo de calor por área, na direção j
- $\dot{q}\,$ taxa de geração de calor volumétrica
- R constante universal dos gases
- Re Número de Reynolds
- S_d velocidade de propagação da chama, no modelo de chama coerente
- $S^0_{\scriptscriptstyle L}$ velocidade de chama laminar, referida à superfície não deformada
- $S_{\scriptscriptstyle L}$ velocidade de chama laminar
- $S_{\tau}\,$ velocidade de chama turbulenta
- S_N velocidade de propagação normal à superfície da chama
- ${\cal T}\,$ temperatura absoluta
- T_b temperatura absoluta do gás queimado
- T_u temperatura absoluta do gás não queimado
- v_i vetor velocidade na direção i
- $v_{i,j}\,$ tensor gradiente de velocidade, da velocidade no eixo i na direção j

- $\boldsymbol{v}_{k,k}$ divergente do campo vetor velocidade
- $V^q_j\,$ velocidade de difusão da espécie química q, na direção j
- v^\prime escala de velocidade da flutuação turbulenta, na parametrização do modelo proposto
- $v^{\prime\prime}$ flutuação turbulenta de velocidade, na média de Favre
- $Y_q\,$ fração mássica da espécie química q
- $W^q\,$ peso molecular da espécie química q

Letras gregas

 $\beta_r\,$ expoente da lei de Arrhenius, para a reação-r

- $\delta\,$ espessura da chama, incluindo zona de pré-aquecimento e de reação
- $\delta\,$ tensor delta de Kronecker
- $\epsilon\,$ taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
- ϵ_{ij} taxa de deformação angular

 κ curvatura

- μ viscosidade dinâmica molecular
- $\mu_{\scriptscriptstyle T}\,$ viscosidade dinãmica turbulenta
- $\nu\,$ viscos
idade cinemática molecular
- $\nu_{\scriptscriptstyle T}\,$ viscos
idade cinemática turbulenta
- $\nu_{q,r}',\,\nu_{q,r}''$ coeficientes molares da reação-r, da espécie-q
- $\rho~{\rm densidade}$
- $\rho_u\,$ densidade do gás não queimado
- ρ_b densidade do gás queimado
- $\overline{\rho}\,\widetilde{v_i''v_i''}$ tensor de tensões turbulentas de Reynolds, na média de Favre
- $\omega^c\,$ termo fonte da variável de progresso c
- $\omega^q\,$ termo fonte da espécie química q
- $\Sigma\,$ densidade de superfície de chama
- Σ_q somatório em q
- $\sigma_t\,$ fator de amplificação de superfície de chama
- σ_{ij} tensor de tensões viscosas
- τ_{ij} tensor de tensões
- $\tau_{\scriptscriptstyle T}\,$ escala de tempo integral da turbulência
- $\tau_{\scriptscriptstyle t}\,$ escala de tempo dissipativo da turbulência

- $\tau_q\,$ escala de tempo química
- $\chi\,$ taxa de dissipação escalar
- $\omega\,$ taxa de restauração cinemática

Capítulo 1

Introdução

A presente tese tem motivação na modelagem numérica da combustão do hidrogênio em instalações nucleares. A oxidação dos elementos estruturais de um reator de fissão nuclear a alta temperatura, durante excursões de potência e a intermitência da refrigeração a água, podem produzir quantidade apreciável de hidrogênio, trazendo o perigo de uma explosão e comprometendo estruturalmente a contenção do material radioativo, a exemplo do ocorrido em *Fukushima Daichii* em Março de 2011, visto por Weightman (2011).

A formação do hidrogênio dentro do edifício de contenção é um acidente contra o qual a instalação deve ser projetada, e cuja principal causa é a oxidação do zircônio dos elementos combustíveis e do carbeto de boro, veneno para nêutrons; ambos no contato com vapor d'água superaquecido. A combustão do hidrogênio pode se processar de dois modos distintos: a deflagração, propagada através da difusão de calor e espécies químicas; e a detonação, através de compressão da mistura inflamável. A detonação é um regime de queima a alta velocidade, capaz de originar sobrepressões da ordem de centenas de atmosferas.

O foco desta tese é a simulação da aceleração de chama, um fenômeno aerodinâmico que pode ocasionar uma detonação a partir de ignições de baixa energia; sendo um dos itens de segurança da AIEA (Agência Internacional de Energia Atômica) a ser verificado no licenciamento das usinas nucleares refrigeradas a água, no relatório técnico de Abou-Rjeily et al.(2011). O fenômeno é explicado no relatório dedicado da OECD NEA (Organisation for Economic Cooperation and Development, Nuclear Energy Agency) de Breitung et al.(2000).

No presente momento, existem experimentos para determinar se a transição deflagração-detonação irá ocorrer ou não, para geometrias simples com obstruções periódicas de um determinado formato, tamanho e espaçamento. Todavia, a tarefa prática de avaliar este fenômeno numa planta nuclear complexa, e para diferentes cenários acidentais, permanece insatisfatória em relação à determinação da ocorrência e da severidade da deflagração/detonação resultante. O aprimoramento dos modelos de combustão visa compatibilizar limites de exequibilidade do poder computacional disponível com o ambiente de projeto industrial, onde é necessária a precisão de engenharia, mas não é possível ater-se ao detalhe da simulação até as escalas mais finas no escoamento, com a resolução detalhada das células de detonação.

O objetivo desta tese é deduzir a partir de equações fundamentais e hipóteses bastante simples, uma nova parametrização da velocidade de chama, que se traduza num modelo de combustão computacionalmente leve, e com capacidade de simular a aceleração de chama satisfatoriamente nas escalas de interesse de estudos de segurança nuclear. Para tanto, é simulado um experimento de aceleração de chama num túnel fechado de seção prismática, com interposição de obstáculos para a passagem da frente da chama, dos artigos de Johansen, Ciccarelli e Parravani (2009, 2010 e 2013). As velocidades de propagação serão comparadas com a referência experimental, para diferentes modelos numéricos de combustão. Isto permitirá comparar a aderência de cada modelo, e avaliar se o modelo proposto apresenta vantagens.

1.1 Presença do hidrogênio nas instalações nucleares

As pastilhas de urânio enriquecido entre 3,5% e 4% são o material primordial do elemento combustível, e cuja fissão é responsável pela geração de potência. As pastilhas de urânio são dispostas dentro de varetas combustíveis, cujo material estrutural é o zircônio, espaçadas por grades de inconel na fig.1.1. Este é preferido em relação outros metais devido à sua baixa seção de choque de absorção de nêutrons, ou seja, a presença deste metal não afeta negativamente a densidade de nêutrons disponíveis para reação de fissão em cadeia, nem sua integridade mecânica na estrutura metálica é degradada significantemente ao longo da vida útil do elemento combustível.

O zircônio é oxidado através da seguinte reação com vapor d'água superaquecido:

$$Zr + 2H_2O \rightarrow ZrO_2 + 2H_2 - 586, 6 \, kJ$$
 (1.1)



Figura 1.1: Elemento combustível de uma planta PWR, Uetsuka et al.(2007).

A oxidação do zircônio durante a falta de refrigeração do reator resfriado a água (PWR/BWR) pode produzir grandes quantidades de hidrogênio, conforme Baker e Just (1962) e Yang et al.(1991). A tabela 1.1 mostra as grandes quantidades de zircônio e carbeto de boro nos tipos mais comuns de reatores resfriados a água leve. Em complemento, a tabela 1.2 fornece uma estimativa das massas de hidrogênio para uma oxidação de 100% do zircônio presente em cada projeto de reator. A segunda maior fonte de hidrogênio é a oxidação do carbeto de boro, que é um absorvedor de nêutrons. Neste segundo caso, não existe uma reação única para produzir hidrogênio, podendo a oxidação ocorrer com participação de outras substâncias químicas, tais como: monóxido ou dióxido de carbono, e metano; apresentado em Abou-Rjeily et al.(2011).

Reatores do tipo PWR utilizam pequena quantidade de B_4C , porém no BWR a quantidade é cerca de quatro vezes maior, podendo chegar perto de 10% de todo o hidrogênio originável através de oxidação, tabela 1.3. O documento TECDOC-1578 de Uetsuka et al.(2007) trata dos diferentes combustíveis para cada tipo de reator. Há outras fontes de hidrogênio, como por exemplo a radiólise da água, porém as taxas de produção são muito menores.

	PWR Típico (3600 MW-th)	PWR P4-P'4 Francês (3800 MW-th)	PWR N4 Francês (4270 MW-th)	WWER- 1000 Com- bustível Russo	WWER-1000 Westinghouse Combustível Temelin, Rep.Tcheca	BWR Típico (3800 MW-th)
B_4C	zero	$\sim 320 \text{ kg}$	${\sim}340~{\rm kg}$	${\sim}270~{\rm kg}$	${\sim}200~{\rm kg}$	${\sim}1200~{\rm kg}$
Zr	$\sim 26 \text{ ton}$	$\sim 28 \text{ ton}$	$\sim 30 \text{ ton}$	~22.63 ton (cladeado 1% Nióbio)	~ 24.77 ton (espaçadores ~ 1.1 ton)	$\sim 76 \text{ ton}$
UO_2	$\sim 100 \text{ ton}$	$\sim 115 \text{ ton}$	$\sim 124 \text{ ton}$	~ 80.1 ton	~ 91.75 ton	$\sim 155 \text{ ton}$

Tabela 1.1: Ordens de grandeza de massas de zircônio e carbeto de boro para plantas PWR, WWER e BWR, Abou-Rjeily et al.(2011).

Tabela 1.2: Hidrogênio produzido, considerando 100% de oxidação de Zr, Abou-Rjeily et al.(2011)

	PWR	PWR	PWR N4	WWER-	WWER-1000	BWR
	Típico	P4-P'4	Francês	1000 Com-	Westinghouse	Típico
	(3600	Francês	(4270)	bustível	Combustível	(3800
	MW-th)	(3800	MW-th)	Russo	Temelin,	MW-th)
		MW-th)			Rep.Tcheca	
Zr	$\sim 26 \text{ ton}$	$\sim 28 \text{ ton}$	$\sim 30 \text{ ton}$	~ 22.63 ton	~ 24.77 ton	$\sim 76 \text{ ton}$
H_2	${\sim}1.150~{\rm kg}$	${\sim}1.238~{\rm kg}$	${\sim}1.327~{\rm kg}$	${\sim}1.000~{\rm kg}$	${\sim}1.095~{\rm kg}$	${\sim}3.360~{\rm kg}$

Tabela 1.3: Hidrogênio gerado pela oxidação de B_4C , Abou-Rjeily et al.(2011)

	PWR P4-P'4 Francês (3800 MW-th)	PWR N4 Francês (4270 MW-th)	WWER-1000 Combustível Russo	WWER-1000 Westinghouse Comb. Temelin, Rep.Tcheca	BWR Típico (3800 MW-th)
B_4C	${\sim}320~{\rm kg}$	${\sim}340~{\rm kg}$	${\sim}270~{\rm kg}$	${\sim}200~{\rm kg}$	${\sim}1200~{\rm kg}$
H_2	${\sim}45\text{-}90~\mathrm{kg}$	${\sim}50100~\mathrm{kg}$	${\sim}40\text{-}80~\mathrm{kg}$	${\sim}30\text{-}60~\mathrm{kg}$	${\sim}180\text{-}360~\mathrm{kg}$

O hidrogênio é um combustível de fácil ignição, com amplo intervalo de inflamabilidade e também é o combustível mais facilmente detonável, tabela 1.4. Sua baixa densidade, faz com ele se acumule preferencialmente na parte mais alta da contenção, ainda dentro do circuito primário: reator nuclear, gerador de vapor e equipamentos e tubulação associados. Caso as válvulas do pressurizador permitam sua liberação para o espaço dentro do prédio, o gás tenderá a se acumular próximo ao teto da instalação.

Propagação	Limite inferior $(\% \text{ em volume})$	$\begin{array}{l} \text{Limite superior} \\ (\% \text{ em volume}) \end{array}$
ascendente	4,1	74
descendente	9,0	74
horizontal	6,0	74

Tabela 1.4: Inflamabilidade de misturas Ar-hidrogênio, em condições ambiente (0.1MPa, 25 Celsius), Abou-Rjeily et al.(2011)

Uma eventual ruptura colocaria em xeque a estanqueidade da contenção do material radioativo. A preocupação com o perigo associado ao hidrogênio em instalações nucleares não é recente, tendo já sido contemplada em relatórios da NUREG por Sherman e Berman (1987) e Stamps et al.(1991); no cálculo simplificado de Maresca et al.(1993) para estimar cargas dinâmicas estruturais; e mais recentemente no trabalho de Fineschi et al.(2001), que trata especificamente da implementação de medidas mitigadoras.

Entre as possíveis medidas de proteção estão:

- diluição do H_2 a concentrações não inflamáveis/detonáveis, Stamps et al.(1991);
- inertização permanente da contenção do reator, com gases não inflamáveis CO_2/N_2 , praticável para BWR (volumes reduzidos);
- inertização ativa/parcial, após detecção de vazamento;
- recombinantes catalíticos passivos, PAR (*Passive Autocatalytic Recombiners*) Royl et al.(2000), para converter parte do hidrogênio de volta à água;

- ignição deliberada, provocando a queima de pequenas massas inflamáveis, para evitar grandes explosões resultantes de acumulações maiores;
- alívios para a atmosfera, sendo H_2 menos denso que o ar;
- projeto da planta, minimizando oportunidades de aceleração de chama para diferentes locais de ignição.

Os fabricantes de plantas nucleares apresentam diferentes implementações destas medidas, cujas efetividades reais são bastante difíceis de serem avaliadas objetivamente. Neste contexto, a capacidade de simular uma explosão de hidrogênio, para diferentes cenários de concentração, mistura e pontos de ignição, em geometria arbitrariamente complexa, permitiria avaliar quantitativamente a efetividade e economicidade de cada uma das medidas acima.

Para o acidente de base de projeto, a oxidação da espessura do cladeamento de zircônio é limitada a 17%, pois este é o critério para a transição dúctil-frágil através da formação de hidretos no cladeamento das varetas combustíveis, conforme Hózer et al.(2002). Valores superiores não permitem retomar a operação da instalação de forma segura, sem antes substituir os elementos combustíveis. Logo, existe uma concentração máxima segura do hidrogênio liberado na oxidação do zircônio, que inclusive é considerada no licenciamento de segurança da planta nuclear. A acurácia no cálculo impacta tanto o licenciamento, quanto o cálculo do dano estrutural que pode ser evitado. Desta forma, o cálculo da aceleração de chama possui sua importância na tecnologia e segurança nucleares.

1.2 Organização do trabalho

A revisão bibliográfica é composta por um breve preâmbulo sobre a combustão pré-misturada, com a devida caracterização de seus regimes pela interação chamaturbulência; seguido por um detalhamento dos modelos clássicos de combustão, com as hipóteses aplicadas em ordem lógica para simplificação do problema; e uma análise comparativa das principais características destes modelos, suas vantagens e limitações são diferenciadas. Em especial a restritiva hipótese de incompressibilidade, a qual representa uma oportunidade de melhoria através do novo modelo de combustão proposto na tese. É mostrado o estado da técnica na implementação destes modelos, e seu desempenho na análise de segurança. A revisão é completada com a descrição do experimento de Ciccarelli et al.(2010), utilizado como referência para as simulações desta tese. No capítulo seguinte, o objeto da tese é formalmente apresentado: a partir de equações fundamentais, postula-se a existência de um termo adicional para considerar a expansão dos gases queimados, e procede-se à sua dedução; bem como a derivação de uma equação evolutiva para o campo de pressão, equivalente à equação de energia. É analisado o comportamento assintótico destes equacionamentos para os escoamentos nos limites de baixo e alto número de Mach. Em seguida, a parametrização do modelo proposto é apresentada, e o conjunto de equações resolvidas é detalhado com suas respectivas hipóteses.

O modelo de simulação é descrito com geometria, discretização e condições iniciais e de contorno; são identificadas as dificuldades na verificação numérica das ordens de convergência, devido às diferenças de fase para escoamentos transientes, especialmente na transição de regime subsônico-supersônico.

Finalmente, são apresentados os resultados numéricos obtidos utilizando o novo modelo proposto e dois modelos clássicos de combustão pré-misturada: o modelo de chama coerente de Boger et al.(1998), e o modelo da velocidade de chama turbulenta com a correlação de Peters (1999). Seguem-se considerações sobre os resultados e as aderências dos modelos. Na conclusão, são indicadas possíveis linhas de pesquisa para continuação deste trabalho.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

A modelagem da combustão trata essencialmente da interação da chama com a turbulência, tendo por principais objetivos: a determinação da taxa de queima; a localização, estabilidade e forma da superfície da chama; e a distribuição de temperatura e espécies.

A determinação da taxa de queima e da localização da superfície é importante para a ancoragem e estabilização da chama.

A determinação da distribuição de temperatura e das espécies é necessária para determinar requisitos de durabilidade metalúrgica e a redução da emissão de poluentes.

Para estes problemas industriais, faz-se necessário resolver a estrutura da chama com os perfis de concentração das espécies e a intermitência intrínseca à superfície, na melhor técnica disponível.

Há diferentes abordagens de modelagem para a combustão pré-misturada. Excluindo-se sofisticações como o transporte da densidade de probabilidade de escalares reativos, alguns dos modelos clássicos são:

- modelagem da taxa de mistura: para a combustão pré-misturada: *Eddy Break Up*, Bray-Moss-Libby (limite bimodal) e modelo de chama coerente (CFM);
- modelagem por velocidades de chama turbulenta: equação-G e suas variantes;
- cálculo da termoquímica detalhada: lei de Arrhenius e acoplamentos entre dezenas a centenas de espécies;

As duas primeiras linhas assumem a hipótese de *flamelet*, na qual o elemento de chama é uma superfície impermeável à penetração de vórtices, cuja precisão

depende da resolução espacial da simulação. Já para a termoquímica detalhada, altíssima resolução espacial e temporal são requeridos.

O nível de detalhe fluidodinâmico pode ser escalonado em três níveis bem separados:

- FANS/RANS *Favre/Reynolds Averaged Navier-Stokes*, vórtices turbulentos não-resolvidos são modelados por meio de uma viscosidade *eddy* em cada elemento computacional, através da hipótese de Boussinesq, dos modelos de turbulência isotrópicos;
- LES *Large Eddy Simulation*, as grandes escalas turbulentas são resolvidas, as escalas menores que a grade computacional são modeladas;
- AMR *Adaptive Mesh Refinement*, regiões com gradientes pronunciados são seletivamente resolvidos com maior definição espacial e/ou temporal;
- DNS, *Direct Numerical Simulation*, todas as escalas espaciais entre as escalas dissipativas de Kolmogorov e as integrais são resolvidas.

Na disponibilidade de maior poder computacional, a tendência natural é a de eliminar incertezas de calibração de modelos e as limitações de validade das modelagens, através da utilização de modelos estruturalmente mais simples e menos dependentes de hipóteses simplificadoras; porém calculados em malhas computacionais muito mais refinadas e com passos de tempo bastante reduzidos, a exemplo do que já ocorre no estudo da turbulência.

Enquanto a simulação da detonação requer apenas a marcha hiperbólica das equações de Euler, para resolver as superfícies sônicas e células de detonação da ordem de centímetros; a transição deflagração-detonação é um fenômeno fluidodinâmico viscoso, devido à amplificação da superfície da chama e nucleação de pontos quentes na mistura inflamável, necessitando da resolução das equações de Navier-Stokes em escalas consideravelmente menores.

2.1 Combustão pré-misturada

A interação do elemento de chama (*flamelet*) com a turbulência permite uma diferenciação dos regimes em nível microscópico:

- *flamelet* não-corrugada (chama fina): a chama é laminar e isenta de vórtices, que são maiores que a espessura da chama;
- *flamelet* corrugada (chama espessa): os vórtices são capazes de penetrar na zona de pré-aquecimento, mas não na zona de reação;
- reação distribuída: vórtices estão presentes na zona de reação, tornando os reagentes imediatamente disponíveis para ocorrência das reações.

Na combustão pré-misturada, estes regimes podem ser identificados por um par de números adimensionais independentes:

$$Da = \frac{\tau_T}{\tau_q} = \left(\frac{L_T}{v'}\right) \left(\frac{S_L}{\delta}\right). \tag{2.1}$$

o número de Damköhler, razão entre a escala de tempo integral da turbulência $\tau_{_T}$, igual à razão entre a escala espacial integral turbulenta $L_{_T}$ e a flutuação turbulenta da velocidade v'; e o tempo característico químico τ_q , igual à espessura da chama δ sobre a velocidade de chama laminar $S_{_L}$.

No limite de Da >> 1, a chama é fina, e apesar da superfície de chama poder ser perturbada e curvada pela turbulência (*flamelet* não-corrugada), a taxa de queima não é afetada pela dinâmica do escoamento. O outro limite, com Da << 1, corresponde à reação distribuída. Para números de Damköhler afastados destes extremos, a determinação do regime de queima requer observar outro adimensional,

$$Ka = \frac{\tau_q}{\tau_t} = \left(\frac{\delta}{S_L}\right) \left(\frac{v_t}{l_t}\right) = \left(\frac{l_t}{\delta}\right)^2.$$
(2.2)

o número de Karlovitz, razão entre a escala de tempo característico químico τ_q e a escala de tempo dissipativa de Kolmogorov τ_t . Sendo as escalas dissipativas de velocidade: $v_t = (\nu \epsilon)^{1/4}$; e comprimento $l_t = (\frac{\nu^3}{\epsilon})^{1/4}$. Ka também é igual ao quadrado da razão entre a escala espacial dos vórtices dissipativos l_t e a espessura da chama δ .

Um número de Karlovitz maior ou igual à unidade, $Ka \ge 1$ do critério de Klimov-Williams, sugere que os menores vórtices são capazes de entrar na espessura da chama. Veynante e Vervisch (2002) fazem a seguinte distinção: se a espessura δ for baseada na difusividade térmica, Ka = 1 indica presença de vórtices na zona de pré-aquecimento (*flamelet* corrugada), conforme o diagrama de Borghi na figura 2.1, que apresenta o domínio de cada regime de combustão nas escalas espacial e de velocidade. Alternativamente, se δ for baseada na espessura da zona de reação química, Ka = 1 corresponderia à queima com reação distribuída. A zona de reação tem espessura aproximadamente dez vezes menor que a chama com a zona de pré-aquecimento.



Figura 2.1: Diagrama de Borghi para combustão pré-misturada, baseado no diagrama utilizado por Ciccarelli e Dorofeev (2008)

2.2 Modelo de taxa de queima limitada por mistura turbulenta

Para contornar o custo computacional associado à resolução da cinética química, Spalding (1971) criou um modelo de combustão com as seguintes hipóteses:

- a combustão ocorre por reações químicas infinitamente rápidas;
- a taxa de queima é limitada pela escala de tempo integral da mistura turbulenta, proporcional a $\epsilon/k = 1/\tau_T$;
- a taxa de reação é proporcional à correlação das flutuações turbulentas da fração de massa;
- a combustão é pré-misturada.

Utilizando as três primeiras hipóteses, o termo de produção das espécies químicas teria um fechamento com a forma:

$$\omega^q = C_{EBU} \,\overline{\rho} \, \frac{\epsilon}{k} \, \widetilde{(Y_q''^2)}^{1/2} \,. \tag{2.3}$$

Ao aplicar a quarta hipótese, o conjunto de equações nas espécies Y_q pode ser reduzido a uma equação na variável de progresso c, que é a temperatura reduzida na equação 2.4; pois a composição química é uniforme e o estado termoquímico fica caracterizado somente pela temperatura:

$$c = \frac{T - T_u}{T_b - T_u},\tag{2.4}$$

onde T_b é a temperatura de chama adiabática, e T_u a temperatura da mistura inflamável antes da queima e não pré-aquecida, com o termo fonte:

$$\omega^q = C_{EBU} \,\overline{\rho} \, \frac{\epsilon}{k} \, \widetilde{(c''^2)}^{1/2} \,. \tag{2.5}$$

Sabendo-se que c é adimensional, a expressão pode ser ainda mais simplificada:

$$\overline{\rho}\,\widetilde{c''^2} = \overline{\rho\,(c-\tilde{c})^2} = \overline{\rho}\,(\tilde{c^2}-\tilde{c}^2) = \overline{\rho}\,\tilde{c}\,(1-\tilde{c})\,,\tag{2.6}$$

resultando:

$$\omega^{q} = C_{EBU} \,\overline{\rho} \,\frac{\epsilon}{k} \,\widetilde{c} \left(1 - \widetilde{c}\right). \tag{2.7}$$

Posteriormente, Magnussen e Hjertager (1977) estenderam este modelo para a combustão não pré-misturada, complementando a terceira hipótese para que esta

seja referida à espécie química mais deficitária, com o nome *Eddy Dissipation Concept.*

Poinsot e Veynante (2005) fazem ressalvas: os coeficientes de ajuste de EBU/EDC devem ser calibrados para cada caso de aplicação, e a escala de tempo a ser empregada possui certa arbitrariedade; além do fato de que na combustão não pré-misturada (EDC), combustível e oxidante queimam ao contato, não sendo possível estudar ignição e estabilização da chama.

2.3 Modelo de Bray-Moss-Libby

O modelo de Bray-Moss-Libby (1977, 1981 e 1982) ou modelo do limite bimodal, é o primeiro a utilizar uma função densidade de probabilidade para descrever a combustão. Nele, são definidas as probabilidades α , $\beta \in \gamma$, de encontrar num ponto do escoamento: gases não queimados (α), gases queimados (β) ou queimando (γ):

$$p(c; x; t) = \alpha \,\delta(c) + \beta \,\delta(1-c) + \gamma \,f(c) \,. \tag{2.8}$$

A probabilidade total p é normalizada à unidade. Os valores de α , β e γ relacionam-se a uma variável de progresso da reação na equação acima. A cada probabilidade está associada a um estado termoquímico bem definido, de forma que determinar a variável de progresso equivale a caracterizar o estado termoquímico na célula computacional.

São hipóteses do modelo:

- combustão pré-misturada;
- baixo número de Mach;
- forças de campo e tensões viscosas produzem trabalho desprezível;
- expansão dos gases ocorre somente na região da reação, o restante do escoamento é incompressível;
- espessura da chama é fina (*flamelet* não-corrugada), de modo que a chance de amostrar gases em reação γ é zerada, por isto o nome bimodal.

Aplicando-se as simplificações na equação da energia e definindo a variável de progresso c (temperatura reduzida), a equação de transporte (obtida a partir da

equação da energia) fica:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\tilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\tilde{v}_j\tilde{c}) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho D}\frac{\partial c}{\partial x_j} - \overline{\rho}\widetilde{v_j'c''}) + \omega^c.$$
(2.9)

Na equação 2.9, os termos à esquerda são as derivadas temporal local e advectiva (derivada total de c); à direita um termo difusivo; um fluxo turbulento; e um termo fonte devido à taxa de combustão. O fluxo turbulento é chamado de difusão contragradiente, pois pode acelerar a chama acentuando os gradientes térmico e de espécies; e segundo o livro de Poinsot e Veynante (2005) é um termo de empuxo com origem na diferença de densidades na fronteira entre os gases frios e quentes.

Bray e Moss (1977) deduziram uma equação para o transporte do produto c(1-c):

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho c \left(1-c\right)\right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho v_j c \left(1-c\right)\right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial}{\partial x_j} \left[c \left(1-c\right)\right]\right) + 2\rho D \frac{\partial c}{\partial x_j} \frac{\partial c}{\partial x_j} - (2c+1)\omega^c \right]$$
(2.10)

Ao aplicar a hipótese bimodal c(1-c) = 0 e aplicar a média de Favre, a taxa média de reação é isolada:

$$\overline{\omega^c} = \frac{1}{2c_m - 1} \left(\overline{2\rho D \frac{\partial c}{\partial x_j} \frac{\partial c}{\partial x_j}} \right) = \frac{\overline{\rho} \tilde{\chi_c}}{2c_m - 1}, \qquad (2.11)$$

onde c_m é a temperatura reduzida, ponderada por w^c , e $\tilde{\chi_c}$ é a taxa de dissipação escalar de c.

Se for utilizada a aproximação $\tilde{\chi_c} = \tilde{c''^2}/\tau_T$, pode-se aplicar a mesma consideração de Spalding, e a taxa de reação será:

$$\overline{\omega^c} = \frac{1}{2c_m - 1} \,\overline{\rho} \,\frac{\epsilon}{k} \,\widetilde{c} \left(1 - \widetilde{c}\right). \tag{2.12}$$

Esta última dedução recupera o modelo EBU, mas permite uma observação importante: o fator $\frac{1}{2c_m-1}$ encapsula toda a influência da química na taxa de reação, enquanto que o restante é referente à taxa de mistura turbulenta (taxa de dissipação escalar).

Num posterior artigo de Bray et al.(1986), o grupo c(1-c) recebe um significado físico, sendo identificado como proporcional à taxa de intermitência da chama (*flame crossing frequency*).

2.4 Modelo de chama coerente

O modelo de chama coerente de Boger et al.(1998) pressupõe:

- que a taxa de queima ω^c , na equação da variável de progresso c, é proporcional à área da superfície da chama, e à taxa de consumo s_c ;
- a hipótese de *flamelet*, da chama laminar não-perturbada pelos vórtices turbulentos;
- que a superfície da chama e sua evolução temporal é completamente determinada por: posição, versor normal, duas curvaturas principais e suas direções, taxa de consumo de reagentes e taxa de estiramento de superfície;
- que a chama se propaga sempre na direção normal à sua superfície, Pope (1988);
- que o estiramento da superfície ocorre apenas na direção tangencial da superfície, conforme expressão deduzida por Candel e Poinsot (1990), assinalada na eq.2.13.

As demais hipóteses são as mesmas do modelo de Bray-Moss-Libby, cujo fechamento do termo fonte ω^c da equação 2.9, é realizado através de uma equação de transporte para a densidade de superfície de chama Σ :

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\langle v_j \rangle \Sigma) + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} (\langle S_d \, n_j \rangle \Sigma)}_{\text{propagação normal}} = \underbrace{\langle (\delta_{ij} - n_i \, n_j) \, \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \rangle \Sigma}_{\text{estiramento}} + \underbrace{\langle S_d \, \frac{\partial n_j}{\partial x_i} \rangle \Sigma}_{\text{curvatura}}, \quad (2.13)$$

onde os delimitadores $\langle \rangle$ indicam uma ponderação por área na superfície da chama.

Os três termos do lado esquerdo da equação 2.13 são: variação temporal, advecção e propagação normal (versor n_j normal à superfície da chama).

No lado direito da equação 2.13: o tensor $(\delta_{ij} - n_i n_j)$ é simétrico em $i \in j$; ao ser multiplicado pelo tensor gradiente de velocidade, resulta no termo de produção de superfície por estiramento, na direção tangencial à superfície; que é semelhante ao termo de estiramento descrito por Bradley et al.(1992) na obtenção de uma correlação para velocidade de chama turbulenta.

O termo mais à direita é o consumo de superfície pela queima e destruição pela curvatura, expresso em função da velocidade de propagação S_d e da curvatura (gradiente de n_j). Para simplificar a equação exata 2.13, consideram-se as seguintes hipóteses:

- baixo número de Mach, no qual a propagação normal da chama pode ser modelada por meio da difusão de calor e espécies;
- a taxa de estiramento pode ser decomposta em duas parcelas, Trouvé e Poinsot (1994); por argumentos dimensionais das escalas de tempo, a taxa da superfície média é governada pela taxa de deformação do escoamento médio, a parte simétrica do tensor gradiente de velocidade; enquanto a taxa ocasionada pela turbulência é proporcional a ε/k de dissipação de energia cinética das grandes escalas turbulentas.

A equação modelada possui a forma genérica:

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{v_j} \Sigma) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\frac{\nu_T}{\sigma_c} \frac{\partial \Sigma}{\partial x_j}) + \kappa_m \Sigma + \kappa_T \Sigma - D, \qquad (2.14)$$

onde a propagação normal foi substituída por uma difusão turbulenta com viscosidade ν_T/σ_c ; o estiramento foi expandido nos termos com $\kappa_m \Sigma$, devido ao escoamento médio; e $\kappa_T \Sigma$, devido às flutuações turbulentas.

O estiramento da superfície $\kappa_m \Sigma$ pelo escoamento médio é dependente do tipo de problema. Considerando um exemplo de aplicação em que a superfície de chama é pouco influenciada pelo escoamento, com Mach $M \ll 1$, um possível fechamento seria:

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{v}_j \Sigma) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\frac{\nu_T}{\sigma_c} \frac{\partial \Sigma}{\partial x_j}) + \alpha_0 \frac{\epsilon}{k} \Sigma - \beta_0 \langle s_c \rangle \frac{\Sigma^2}{\tilde{c} (1 - \tilde{c})}, \qquad (2.15)$$

com o termo de destruição proporcional à velocidade de consumo dos reagentes $\langle s_c \rangle$ e à própria superfície onde ocorre a queima; e constantes de ajuste α_0 e β_0 .

Se a equação 2.15 for tomada no referencial de uma chama não-acelerada e em regime permanente; os termos e variação temporal, advectivo e difusivo desaparecem, e os termos de produção e destruição se equilibram.

De onde é possível obter a taxa de queima $\overline{\omega^c}$ em função do estiramento provocado pela turbulência:

$$\overline{\omega^c} = \rho \left\langle s_c \right\rangle \Sigma = \rho \, \frac{\alpha_0}{\beta_0} \, \frac{\epsilon}{k} \, \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \,. \tag{2.16}$$

A forma de $\overline{\omega}^c$ obtida é a mesma dos modelos de Bray-Moss-Libby e de Spalding. Logo, permite-se interpretar estes modelos como sendo casos particulares do modelo de chama coerente, nos quais produção e destruição de chama estão balanceados localmente em cada célula computacional.

Outros fechamentos alternativos para a equação em Σ estão compilados no livro de Poinsot e Veynante (2005) e no artigo de Veynante e Vervisch (2002).

2.5 Modelo da advecção de campo escalar e a velocidade de chama turbulenta

No artigo de Peters (1999), é apresentado um modelo de combustão com as seguintes hipóteses:

- combustão pré-misturada;
- vórtices da escala dissipativa de Kolmogorov são capazes de adentrar zona de pré-aquecimento, mas não na zona de reação;
- densidade varia ponto a ponto, mas não se considera expansão dos gases;
- baixo número de Mach;

O autor apresenta um diagrama de Borghi na figura 2.2 diferente do mostrado na figura 2.1, na qual é identificada a chama corrugada, como um regime intermediário entre a chama fina e a chama espessa (vórtices na zona de pré-aquecimento). No regime de chama corrugada, age um mecanismo denominado restauração cinemática, descrito por Peters (1999).

O modelo da equação-G é deduzido para a chama corrugada e depois para a chama espessa, resultando em duas equações-G diferentes, cada qual especializada no seu regime. Na fronteira comum entre os dois regimes, ambas as equações obtidas devem ser iguais. Peters (1999) iguala os termos entre as duas equações nesta fronteira, emendando-as numa única equação válida para ambos os regimes.

Para o regime de chama corrugada, Peters deriva uma equação de um campo escalar G, definido como sendo a distância instantânea do ponto local até a superfície da chama, ou fonte de ignição. Esta definição é puramente cinemática (*level-set*), resultando numa equação de transporte somente com três termos fontes advectivos, correspondentes à: velocidade de chama laminar, correção por curvatura da chama e correção por deformação da chama. A integração do campo G no tempo, equivale a acompanhar a advecção e deformação cinemática das isosuperfícies de G. Pitsch


Figura 2.2: Diagrama de Borghi para combustão pré-misturada, baseado no diagrama utilizado por Peters (1999) e Pitsch et al.(2002)

et al.(2002), que realizaram simulações de grandes escalas utilizando a equação-G, alertam que o campo escalar de G (cinemático) não é conservativo, necessitando de uma reinicialização a cada passo de tempo.

Para o regime de chama espessa, no qual predominam processos difusivos como vórtices de Kolmogorov na zona de pré-aquecimento; G é a fração mássica da espécie química mais deficitária na combustão. Uma velocidade de deslocamento é obtida em função do gradiente da fração mássica em questão, e da taxa de consumo mássica desta espécie. A equação-G resultante deste argumento, possui dois termos fontes: uma advecção com a velocidade de chama laminar; e um termo de correção de curvatura, a ser relacionado com processos difusivos.

Na fronteira entre os dois regimes de chama espessa e corrugada, a correção de curvatura é justificada para a equação-G cinemática, de acordo com o autor, para habilitar o tratamento de instabilidades termo-difusivas e evitar o aparecimento de cúspides na superfície média da chama. A equação-G, consolidada entre as duas deduções descritas, escreve-se:

$$\rho \frac{\partial G}{\partial t} + \rho v_j \frac{\partial G}{\partial x_j} = -\rho S_L^0 \frac{\partial G}{\partial x_j} + \rho D\kappa \frac{\partial G}{\partial x_j} - \rho l_m \frac{\partial v_j}{\partial x_n} \frac{\partial G}{\partial x_n} , \qquad (2.17)$$

onde S_{L}^{0} é a velocidade de chama laminar (não distorcida/deformada), x_{n} é a direção

normal à superfície da chama, κ é uma curvatura, l_m é o comprimento de Markstein, e $S_{\scriptscriptstyle N}$ a velocidade de propagação normal da chama, relacionados por:

$$S_{\scriptscriptstyle L} - S_{\scriptscriptstyle N} = S_{\scriptscriptstyle L} \, l_m \, \kappa \;, \tag{2.18}$$

Peters observa que no limite de altas frequências, o termo de deformação (que contém l_m) desaparece na equação 2.17, e os valores das difusividades das chamas corrugada e espessa convergem. Após a aplicação da média de Favre, o fechamento é por meio de uma correlação para a velocidade de chama turbulenta S_T .

$$\overline{\rho}\frac{\partial \widetilde{G}}{\partial t} + \overline{\rho}\widetilde{v}_j\frac{\partial \widetilde{G}}{\partial x_j} = -\overline{\rho}S_T \frac{\partial \widetilde{G}}{\partial x_j} + \overline{\rho}D_T \kappa \frac{\partial \widetilde{G}}{\partial x_j}.$$
(2.19)

O parâmetro S_{T} é a velocidade de chama de uma isosuperfície $G = G_{0}$. No cálculo, S_{T} é implementada como uma escala de velocidade de chama turbulenta local, modelada dentro de cada célula computacional.

Em realidade existe uma superfície de chama de rápida intermitência, e cuja resolução espacial ainda requeriria uma grade mais refinada dentro de cada célula computacional. Para tratar o detalhe não resolvido na discretização, o termo de curvatura da equação 2.19 é modelado pelo transporte turbulento de uma variância G''^2 :

$$\overline{\rho}\frac{\partial \widetilde{G''^2}}{\partial t} + \overline{\rho}\widetilde{v_j}\frac{\partial \widetilde{G''^2}}{\partial x_j} = -2\,\overline{\rho}\,\widetilde{v''}\,\widetilde{G''}\,\frac{\partial \widetilde{G}}{\partial x_j} - c_s\,\overline{\rho}\,\frac{\epsilon}{k}\,\widetilde{G''^2} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\widetilde{v''_j}\,\overline{G''^2})\,,\qquad(2.20)$$

análogo em forma, à equação para taxa de dissipação em modelos de turbulência a duas equações: com os termos do lado direito correspondendo à: produção, destruição e termo difusivo modelado. Sendo que apenas é considerada a difusão dentro das isosuperfícies de G, na direção x_t tangencial à superfície da chama:

$$-\frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\widetilde{v_j''G''^2}) = \frac{\partial}{\partial x_t}(\overline{\rho}D_T\frac{\partial\widetilde{G''^2}}{\partial x_t}).$$
(2.21)

A relação da flutuação G'', raiz quadrada da variância G''^2 , com a equação-G principal é dada por:

$$\overline{\rho}D_{T}\kappa\frac{\partial\widetilde{G}}{\partial x_{j}} = -\frac{\partial}{\partial x_{j}}(\overline{\rho}\widetilde{v_{j}''G''}). \qquad (2.22)$$

Um posterior artigo de Peters et al.(2000) reverte sua hipótese de não-expansão dos gases, incluindo um termo de "restauração cinemática" negativa no regime de *flamelet* corrugada, cuja função é desfazer o corrugamento de superfícies devido à expansão, promovendo um incremento local da velocidade de propagação.

Há outras formulações na mesma linha do *level-set*, baseadas nas mesmas premissas da equação-G. A diferença principal estando na definição variável transportada, mas preservando a modelagem de uma frente de chama na forma de uma equação de propagação não-homogênea.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j c) = -\rho_u S_T \frac{\partial c}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho D_T \frac{\partial c}{\partial x_j}) .$$
(2.23)

No modelo de fechamento por velocidade de chama turbulenta de Zimont et al.(1998, 2000 e 2005), da equação 2.19 para 2.23, G passa a ser a variável c progresso da reação, com c = 1 correspondente aos gases queimados e (1 - c) à mistura inflamável remanescente. O argumento para substituir ρ por ρ_u no termo fonte advectivo à direita é o de balancear a taxa de consumo nos dois lados da chama, colocado por Zimont et al.(1998).

Tal como o modelo da equação-G, seu desempenho também é ditado pela qualidade da correlação utilizada para fechar $S_{_T}$, cujas modelagens são descritas na próxima seção.

2.6 Correlações para a velocidade de chama turbulenta

Damköhler (1940) assumiu que a estrutura do elemento de chama (*flamelet*) possuía a mesma escala de tempo químico τ_q , para chamas laminares ou turbulentas. A aplicação da análise dimensional com esta hipótese fornece correlações para velocidade de chama do tipo:

$$\frac{S_T}{S_L} = C \left(\frac{D_T}{D}\right)^{1/2}, \qquad (2.24)$$

onde S_L e S_T são as velocidades de chama laminar e turbulenta, e D e D_T são as difusividades molecular e turbulenta. A expressão também pode vir na forma relaxada:

$$\frac{S_T}{S_L} = 1 + C \left(\frac{v'}{S_L}\right)^n, \qquad (2.25)$$

onde v' é a flutuação média turbulenta da velocidade, e onde idealmente seria esperado que as constantes C e n fossem iguais à unidade, no caso em que a

velocidade S_T é soma direta do campo laminar S_L com o de flutuações turbulentas v'.

A correlação de Bradley et al.(1992) baseia-se na consideração de que as chamas turbulentas são compostas por uma população de *flamelets*, elementos de chama laminares. Cada *flamelet* possui local e instantaneamente uma taxa de estiramento de área nas direções tangenciais à superfície. O estiramento aumenta a superfície de chama. Mas quando a superfície é estirada muito rapidamente pela turbulência, a energia disponível pode se tornar inferior à energia de ativação das reações químicas, extinguindo a chama. A equação 2.26 para a taxa de estiramento deduzida por Batchelor (1967) é a mesma de Candel e Poinsot (1990) no modelo de chama coerente na equação 2.13.

$$\frac{1}{A}\frac{dA}{dt} = (\delta_{ij} - n_i n_j)\frac{\partial v_i}{\partial x_j}.$$
(2.26)

A população de *flamelets* de uma dada chama turbulenta pode ser descrita por uma função densidade de probabilidade, cuja abcissa é a taxa de estiramento. Bradley et al. condensaram dados experimentais de chamas em funções gaussianas, com média e desvio padrão correlacionados à taxa de dissipação turbulenta ϵ e à viscosidade cinemática ν . A cada chama turbulenta caracterizada, associa-se uma gaussiana.

A depender da intensidade da turbulência, uma parte da população de *flamelets* possuirá taxa de estiramento superior à taxa de extinção por estiramento. A taxa de extinção por estiramento foi correlacionada ao produto KaLe, números de Karlovitz e Lewis. De posse do limiar de extinção, é possível computar qual a porcentagem das *flamelets* sobrevive a cada instante de tempo, através de uma linha de corte por extinção que delimita uma área da gaussiana. A taxa de estiramento da superfície de chama varia com produto KaLe, conforme argumento derivado de Markstein (1964) e Clavin (1985, 1988).

Segundo Bradley et al.(1992), é razoável assumir que a velocidade de chama turbulenta é máxima se nenhuma parte da população de *flamelets* sofre extinção; todas *flamelets* possuindo taxa de estiramento abaixo do limiar, e a área da gaussiana associada igual à unidade. Segue disto, que a velocidade de chama turbulenta para uma dada chama é o produto da máxima velocidade teórica de chama turbulenta, ponderada pela área de sua gaussiana associada.

A máxima velocidade teórica de chama turbulenta, pode ser obtida de experimentos de chamas com taxa de estiramento aproximadamente nula; ou inferida reversamente, a partir de chamas com taxas de estiramento bem conhecidas.

O algoritmo para estimar a velocidade de uma chama turbulenta pré-misturada seria:

- caracterizar o tipo de chama pela aplicação, descrição do escoamento e reagentes;
- caracterizar a gaussiana de uma chama através de $\epsilon \in \nu$;
- determinar seu limiar de extinção, através do produto Ka Le;
- computar a área da gaussiana que não é extinta;
- a máxima velocidade teórica da chama é obtida de uma correlação com a escala da flutuação turbulenta de velocidade v';
- a velocidade turbulenta da chama é a máxima teórica, ponderada pela área da gaussiana.

Este algoritmo é condensado na correlação de Bradley et al.(1992):

$$\frac{S_T}{v'} = 0,88 \, (Ka \, Le)^{-0.3} \,, \tag{2.27}$$

cuja representação gráfica é a figura 2.3:



Figura 2.3: Dados suavizados, para S_T/S_L contra v'/S_L para diferentes taxas de estiramento, reproduzido de Bradley et al.(1992).

Peters (1999) desenvolveu sua correlação de chama turbulenta com procedimento bastante semelhante ao utilizado para construir a Equação-G. Primeiramente, ele definiu um fator de amplificação de superfície σ_t , relacionado à velocidade de chama turbulenta por:

$$S_{T} = S_{L} \left(1 + \sigma_{t} \right), \tag{2.28}$$

para o qual obteve uma equação de transporte análoga à do transporte de densidade de superfície do modelo de chama coerente, assumindo a mesma hipótese de taxa de queima governada pela intensidade da mistura turbulenta de Spalding (1971). A equação diferencial de σ_t teve os termos fonte e de destruição fechados com equações do modelo $k - \epsilon$, sendo possível obter uma relação para o regime de chama corrugada do tipo:

$$\frac{d\tilde{\sigma}_t}{\sigma_t} = \frac{d\tilde{\epsilon}}{\epsilon} - \frac{d\tilde{k}}{k} + \frac{1}{2} \frac{d\widetilde{G''^2}}{G''^2} \text{ (chama corrugada).}$$
(2.29)

De modo quase idêntico, o procedimento foi repetido para o regime de chama espessa, apenas sendo diferenciado nos termos de fechamento da equação para σ_t , rendendo:

$$2\frac{d\tilde{\sigma}_t}{\sigma_t} = \frac{d\tilde{\epsilon}}{\epsilon} - \frac{d\tilde{k}}{k} + \frac{d\widetilde{G''^2}}{G''^2} \text{ (chama espessa).}$$
(2.30)

O longo argumento que se segue pode ser resumido no seguinte procedimento: dentro de cada termo destas duas equações, a taxa de dissipação ϵ , a energia cinética turbulenta k e a variância G''^2 foram abertos em quantidades relacionadas à flutuação turbulenta de velocidade v', velocidade de chama laminar S_L , escala espacial L_T e difusividade turbulenta D_T da escala integral, para a chama corrugada na equação 2.29; e à espessura de chama na escala dissipativa, para a chama espessa na equação 2.30. Os coeficientes de ajuste entre as quantidades ϵ , $k \in G''^2$ e as quantidades substituídas em seus lugares, foram obtidos dos dados experimentais de Abdel Gayed et al.(1984) e Bradley et al.(1992). No limiar entre os dois regimes, resulta uma equação quadrática algébrica para $\tilde{\sigma}_t$ na forma:

$$\tilde{\sigma_t}^2 + 0.39 \frac{L_T}{\delta} \tilde{\sigma_t} - 0.78 \frac{v' L_T}{S_L^0 \delta} = 0.$$
(2.31)

A correlação de Peters completa, tem portanto a forma:

$$S_T = S_L \left(1 + \sigma_t \right) \,, \tag{2.32}$$

$$\sigma_t = -A \frac{L_T}{\delta} + \sqrt{(A \frac{L_T}{\delta})^2 + B \frac{v' L_T}{S_L \delta}}, \qquad (2.33)$$

onde σ_t é o fator de amplificação de superfície de chama, L_T é a escala integral turbulenta, δ a espessura de chama laminar, e A e B são coeficientes ajustados. A correlação de Peters também pode ser vista como uma modelagem algébrica da equação de transporte da densidade de superfície de chama Σ , dada a proximidade dos significados físicos de Σ e σ_t . Demais variações desta correlação, que também podem ser utilizadas na equação-G e na equação da variável de progresso c, são de Peters et al.(2000), ou de Müller e Peters em conjunto (1994, 1997), também compiladas no livro de Peters (2000).

2.7 Comparação dos modelos clássicos da combustão pré-misturada

Os modelos clássicos da combustão pré-misturada, apresentados nas seções anteriores, podem ser colocados em duas classes: modelos de taxa de mistura, tais como o modelo de Spalding (1971), de Bray-Moss-Libby (1977), e chama coerente de Boger et al.(1998); e modelos de velocidade de chama turbulenta, como a Equação-G de Peters (1999) e de Zimont et al.(1998).

Modelos de taxa de mistura são mais propriamente identificados com o consumo de reagentes, enquanto que modelos de velocidade de chama são naturalmente mais relacionados à advecção puramente cinemática da frente de chama. Nas duas classes, combustível e oxidante encontram-se pré-misturados, e o progresso da reação irreversível é a única variável necessária para determinar o estado termoquímico do campo de escoamento.

Nos modelos de taxa de mistura, o termo fonte da variável de progresso é governado pela taxa específica de mistura turbulenta ϵ/k em cada ponto do escoamento, ou seja, uma grandeza definida microscopicamente e bastante sensível à tensão de cisalhamento nas paredes, com tratamento específico dado por cada modelo de turbulência. Eventualmente necessitando de condições de contorno *ad-hoc* para extinguir ou controlar para a densidade Σ de superfície de chama na parede, como a lei de parede de Poinsot et al.(1993); ou a inclusão de termos de destruição de Σ devido à troca de calor na parede, de Bruneaux et al.(1997).

Segundo Driscoll (2008), uma vantagem dos modelos de taxa de mistura é que as grandezas microscópicas relacionadas: taxa de intermitência de chama (*flame* crossing frequency); taxa de consumo; espessura, taxa de estiramento e densidade de superfície de chama, são bem definidas e podem ser obtidas com as técnicas experimentais atualmente disponíveis.

As formulações dos modelos de Bray-Moss-Libby (1977) e chama coerente de Boger et al.(1998) possuem constantes de ajuste próprias para lidar com a influência da temperatura na taxa de reação, mas requerem calibração dos termos fonte e destruição para cada aplicação específica. Por estes modelos se basearem em quantidades microscópicas, pequenas variações nos coeficientes de ajuste podem exagerar efeitos físicos no cálculo da frente de chama.

Em contraste, nos modelos de velocidade de chama, o termo fonte da variável de progresso é dado pela velocidade de propagação da chama, uma grandeza definida macroscopicamente; que apesar de depender do nível local de turbulência, possui um cálculo pouco sensível ao contato com a parede. A estabilidade numérica também é maior com a velocidade de chama, do que com a taxa de mistura, pois a segunda pode variar por mais ordens de magnitude. Os pontos desfavoráveis são: que a velocidade de chama não é bem definida em nível microscópico, especialmente em escoamentos intermitentes; e a velocidade de chama é fechada ou por estimativas particulares de cálculos numéricos muito refinados (*Direct Numerical Simulation*), por exemplo de Bell et al (2002, 2005); ou mais usualmente por correlações como a de Bradley et al.(1992) ou de Peters (1999), cujos conjuntos de dados originais possuem uma dispersão não-negligenciável e um domínio de validade restrito aos equipamentos industriais mais comuns.

As duas classes representam grande simplificação em relação à modelagem mais rigorosa através da cinética química com a Lei de Arrhenius, reduzindo a carga computacional de dezenas a centenas de equações para espécies químicas reativas, a apenas uma ou duas equações escalares; além do ganho computacional evidente na utilização de passos de tempo consideravelmente maiores. Entretanto, devido à hipótese de reação irreversível, estes modelos não possuem a precisão adequada para cálculos de estabilidade/extinção de chama. Mas podem ser utilizados com confiança para determinar a forma e ancoragem de chamas industriais.

Ambas as classes assumem a hipótese de *flamelet*, elemento de chama laminar, e podem ser estendidas para a combustão não pré-misturada, bastando acrescentar uma equação de transporte para computar a fração de mistura no campo de escoamento. O número de Lewis efetivo é admitido unitário, uma simplificação razoável de todos estes modelos, dado que a difusividade turbulenta térmica e de espécies é da mesma ordem de grandeza devido à mistura turbulenta, e muito superior às difusividades moleculares.

Outra característica essencial destes modelos, tanto da taxa de mistura quanto da velocidade de chama turbulenta, é que ambas assumem baixo número de Mach, portanto desprezando a energia cinética; e campo de escoamento incompressível, salvo na superfície de reação. De modo que a determinação da variável de progresso automaticamente permite encontrar: a temperatura, as frações mássicas das espécies; e a pressão, via equação de estado. Não sendo estritamente necessária a resolução da equação da energia; exceto quando da transferência de calor intensa nas condições de contorno, que não é capturada pela equação da variável de progresso.

As hipóteses de baixo número de Mach e de incompressibilidade são bastante restritivas para o projeto de equipamentos, pois sua validade implica a inadequação para calcular excitações acústicas; informação necessária para o projeto contra ressonâncias em câmaras de combustão. Considerar ou não a compressibilidade dos gases tem influência direta na forma dos modos excitados, que em realidade podem ser mais comprimidos ou elongados de acordo com a compressão ou rarefação dos gases.

O objeto principal da tese é a aceleração da chama aplicada à análise de segurança em instalações nucleares, mas no desenvolvimento do modelo proposto no próximo capítulo, a hipótese de incompressibilidade é descartada, sendo deduzido um termo adicional de expansão dos gases na equação da variável de progresso c, para tratar a compressibilidade. Adicionalmente, a energia cinética não é mais desprezada, requerendo a resolução conjunta com a equação da energia total. Todavia, esta complexidade permite também um cálculo mais rigoroso de excitações acústicas, que ocorrem na transição da deflagração para o regime detonado, estabelecendo o padrão característico de repetição espacial das células de detonação.

Desta forma, a importância da tese não se restringe à análise de segurança e pode no futuro ter um efeito relevante na precisão do cálculo de equipamentos acionados por combustão.

2.8 Experimentos no *Kurchatov Institute*, e o desenvolvimento de modelos para a detonação em larga escala

Dorofeev et al.(1996) apresentaram resultados de experimentos de aceleração de chama e transição deflagração-detonação na instalação de larga escala RUT, no *Kurchatov Institute*.

O RUT (figura 2.4) possui aproximadamente 70 m de comprimento, sendo composto por três partes distintas: um canal longo de 34,6 m com seção 2,5 x 2,3 m^2 , obstruído por obstáculos montados e de altura variável, permitindo diferentes razões de bloqueio (BR, fração da área obstruída para a passagem da chama sobre a área total da seção do túnel); uma câmara retangular (*canyon*) (10,55 x 6,3 x 2,5 m^3); e um corredor reto de 12,3 m de comprimento, acoplado a uma curva com redução de seção. Entre o canal longo obstruído e a câmara retangular há uma restrição de área de passagem (S1); bem como ao final da curva com redução de seção (S2), podendo esta última inclusive ser fechada.



Figura 2.4: Esquemático do RUT, no *Kurchatov Institute*. O lado esquerdo da instalação na figura é lacrado por parede de aço. Comprimento total 69,9 m.

A razão de bloqueio de área (BR) é uma variável importante, na medida em que passagem da chama em câmaras menores compartimentadas, provoca o aparecimento de estruturas vorticais na separação de escoamento. No regime subsônico referido à temperatura da chama, estes vórtices ainda são capazes de influenciar a propagação da frente de chama não difratada, que passa direto pelos obstáculos. Na restrição de seção (S1) entre o canal obstruído e o *canyon*, a chama já alcança velocidade sônica do escoamento não-perturbado; consequentemente, o aumento de seção ocasiona uma rarefação e aceleração local dos gases, permitindo que a DDT ocorra neste compartimento. A restrição de área (S2) tem influência maior nas deflagrações, já que esta seção é a comunicação entre RUT e a atmosfera externa.

Dorofeev et al.(1996) reportaram o total de 11 experimentos, variando a proporção hidrogênio/ar; a razão de bloqueio de área (BR); e áreas de restrição (S1 e S2). Devido às grandes elevações de pressão dentro da instalação, não puderam ser instalados equipamentos de aquisição de imagem, e as medidas foram realizadas através de sensores de pressão e fotodiodos, com posterior cálculo e interpolação para estimar tempos de chegada de onda de pressão e frente de chama.

Destes 11 resultados, quatro indicaram a ocorrência de transição deflagraçãodetonação (DDT): o primeiro, com 14% de hidrogênio em volume e BR 0,6, alcançou o regime detonado no final do canal com obstáculos; os outros três casos ocorreram com 12,5% de hidrogênio em volume e BR 0,3. Enquanto a transição deu-se com o acoplamento da frente de chama com a onda de choque no primeiro caso; nos demais três, a transição ocorreu no *canyon* e muito próximo à parede, indicando a possibilidade de que reflexões de onda e interferência construtiva, tenham nucleado a detonação em pontos quentes localizados, através de compressão.

Na conclusão, Dorofeev et al.(1996) reportam que para os casos de 12,5% de hidrogênio, a velocidade de deslocamento da chama era próxima de 600 m/s no final do canal obstruído, porém o curso livre longitudinal e a largura não eram grandes o suficiente para passagem de um número mínimo de células de detonação. No artigo de Gavrikov et al.(2000), a largura da célula de detonação para esta concentração de hidrogênio é estimada entre 50 cm e 1 m.

O reverso desta constatação é outra conclusão de Dorofeev et al.(1996), de que misturas com baixa concentração de hidrogênio ainda podem sofrer DDT, se a escala geométrica for grande. Este é exatamente o problema mais representativo das plantas nucleares: câmaras estreitas com obstáculos e recintos de grande volume. No artigo de Dorofeev et al.(2000), são realizados testes com uma miniatura do RUT, nos quais a redução da escala geométrica de 62,69 m para 1469 mm é compensada com misturas mais ricas em hidrogênio, reduzindo a largura das células de detonação da ordem de um metro para um centímetro. Os testes em escala reduzida foram instrumentados e fotografados, fornecendo informações para que os autores pudessem estabelecer critérios de ocorrência da DDT; baseados em proporções das geométricas do recinto onde a chama se propaga, com a largura da célula de detonação associada à concentração de hidrogênio do cenário acidental.

Embora o artigo original de Dorofeev et al.(1996) tenha quase duas décadas, a instalação continua a ser referenciada em simulações numéricas. Outro artigo, também de Dorofeev et al.(1993) foi revisitado por Efimenko e Gavrikov (2008), para testes de detonação hidrogênio-ar em larga escala, dentro do projeto *HySafe*.

Nestes artigos, figura uma segunda configuração do RUT, sem o corredor de obstáculos, apenas com o comprimento de 27,55 m, destacado na figura 2.4, com volume de 263 m^3 , entre o último obstáculo na figura (esq. de S1) e a seção à direita (S2), após o trecho curvo. Os experimentos eram duas detonações: a primeira com 20% de hidrogênio em volume, com ponto de ignição localizado na parede direita inferior do *canyon*; a segunda com 25,5%, com ponto de ignição à direita ao final da curva (S2, seção 2,1 x 1,7 m^2). Ambos experimentos utilizaram 200g de explosivos para realizar a iniciação direta da detonação.

Zbikowski et al.(2010) apresentam duas simulações de detonação para estes dois experimentos, com espaçamento de malha de 10 cm. O modelo empregado é o de variável de progresso, com o termo fonte ajustado por velocidade de chama. Por se tratar de detonações, a velocidade de chama foi previamente computada para cada concentração de hidrogênio, utilizando códigos de simulação de cinética química; com valores bastante próximos do estimado pela teoria de clássica de detonação ZND, de Zeldovich, von Neumann e Döring. Os resultados dinâmicos de elevação de pressão, obtidos por Zbikowski et al.(2010), são bastante aderentes ao registrado nos experimentos de referência de Dorofeev et al.(2008).

Yanez et al.(2011) realizam as mesmas duas simulações de Zbikowski et al.(2010) utilizando três modelos de combustão diferentes: Detonação de Heaviside (FZK, *Forschungzentrum Karlsruhe*); Arrhenius (KI, *Kurchatov Institute*); e velocidade de chama turbulenta (UU, *University of Ulster*). O modelo de Heaviside simula uma propagação de uma frente de reação química, e utilizou constantes calibradas para equivaler à lei de Arrhenius. No modelo de velocidade de chama, é utilizada uma estimativa para a velocidade de detonação. Os resultados dinâmicos de elevação de pressão e impulso são bastante aderentes aos experimentos; com alguns picos máximos superestimados; e algumas variações da velocidade de detonação. Yanez et al.(2011) concluem atribuindo as pequenas divergências à difusão numérica e ao espaçamento de malha de 6 a 10 cm, ser maior que as células de detonação de 1,5 a $4,5 \ cm$.

Heidari et al.(2011) também realizaram a simulação da detonação com ignição na seção (S2), utilizando equação com variável de progresso e termo fonte de Arrhenius, com resultados semelhantes a Zbikowski et al.(2010) e Yanez et al.(2011).

Tendo-se que velocidade de detonação é bastante alta e que as ondas de pressão encontram-se acopladas à frente de chama, uma vez atingido o regime detonado, o problema é essencialmente acústico. Isto explica a boa concordância dos métodos de Zbikowski et al.(2010), Yanez et al.(2011) e Heidari et al.(2011), e logo a detonação pode ser tratada por modelos computacionalmente menos custosos que a lei de Arrhenius, quando baseados numa velocidade de chama bem definida.

2.9 Aplicações da combustão computacional na engenharia de segurança nuclear

No estudo de segurança de uma instalação industrial, é requerida a quantificação de danos físicos provocados por uma coleção de cenários acidentais. Estes cenários, de dezenas a centenas, são selecionados com base na probabilidade de ocorrência durante a vida útil da instalação, como também na severidade do resultado destrutivo. O estudo de cenários acidentais é necessário para avaliar a efetividade de medidas mitigadoras no projeto de engenharia.

Opostamente, a capacidade de computação atualmente disponível não permite resolver rigorosamente a aceleração de chama e a transição deflagração-detonação nas escalas adequadas, mesmo para um pequeno número de cenários. Por vezes, a análise é limitada a eventos mais simples, por exemplo: os artigos de Kim et al.(2007), Kim e Hong (2015) para o reator APR1400; e Heitsch et al.(2010) para o reator russo VVER-440/213, são exemplos de estudos visando estimar e/ou limitar a quantidade de gás inflamável.

O panorama da engenharia de segurança tem melhorado, mas ainda é uma solução de compromisso: há disponibilidade de variados códigos para a simulação da combustão, preparados para receber geometrias de larga escala, e calibrados para prover resultados semelhantes aos de experimentos selecionados. Entretanto, cabe uma ressalva: da possibilidade que as calibrações empregadas sejam dependentes de um casamento da escala geométrica a ser simulada com um determinado tamanho de elemento. Uma calibração dependente de escala, poderá prever resultados incorretos com um refinamento de malha, ainda que haja uma eventual convergência dos resultados para casos selecionados.

O código CREBCOM, no artigo de Efimenko e Dorofeev (2001), implementa

um modelo conhecido por incêndio em floresta, Forest Fire ou B0B, cuja regra para ignição dentro de uma célula computacional não segue equações fundamentais. A propagação da chama de uma célula para a próxima ocorre em função da porcentagem de queima completada nas células vizinhas. Há uma constante da taxa de queima K_0 (análoga à velocidade de chama turbulenta), calculada em função da razão de expansão e da escala integral turbulenta, utilizada para determinar a taxa do consumo de espécies. O código implementa os critérios de reatividade de Dorofeev et al.(2001) da razão de expansão σ ; e da escala geométrica 7λ sobre a largura da célula de detonação λ , de Dorofeev et al.(2000) para a transição deflagração-detonação.

CREBCOM é apresentado como ferramenta para estimar danos físicos majorados, tendo sido calibrado pelo tempo de chegada da chama e elevação da pressão no tempo, de experimentos como mc043 (tubo internamente obstruído por placas anulares regularmente espaçadas, cuja geometria foi melhor descrita num artigo posterior, Kotchourko (2005), para defesa do código COM3D) e RUT (instalação de larga escala no *Kurchatov Institute*, Dorofeev et al.(1996).).

No artigo Breitung e Redlinger (1995), sucedido por Redlinger (2008), DET3D (FZK, *Forschungzentrum Karlsruhe*) é apresentado como um código para simular detonações de hidrogênio, ou seja, obter a estimativa do cenário mais severo, quando a detonação é tomada por certa. DET3D resolve as equações de Euler (sem viscosidade, nem aumento de superfície por cisalhamento), tendo os termos fonte das reações químicas dados pela lei de Arrhenius. Este código trabalha com malhas estruturadas, as quais podem ser facilmente refinadas, e implementa resolvedores do problema de Riemann, o que lhe confere grande precisão na resolução da difração da onda de detonação, um problema acústico. É validado para experimentos de média e larga escala, porém sempre assumindo o regime detonado. Em época anterior ao artigo de Redlinger (2008), DET3D já havia sido utilizado por Baumann et al.(2001) para calcular danos provocados por uma detonação de hidrogênio na instalação ITER, atualmente em construção na França, para pesquisa da fusão nuclear com confinamento magnético.

DET3D também foi utilizado por Manninen et al.(2002) para simular a detonação dentro do prédio de um reator BWR (*Boiling Water Reactor*), numa câmara individual com volume de 856 m^3 . Entretanto, para simular o vazamento, dispersão e acúmulo de hidrogênio na parte superior do prédio, e queima no regime deflagrativo, Manninen et al. aplicaram o código comercial FLUENT, com o modelo de taxa de queima limitada por mistura turbulenta (*Eddy Break-Up*),

para depois calcular a detonação com o DET3D. A abordagem de Manninen et al.(2002) é astuta na escolha de ferramentas dentro de seus domínios de validade, porém conservadora ao mesmo tempo; pois a detonação é tida como um evento inevitável se satisfeitos os critérios de reatividade σ de Dorofeev et al.(2001), e escala geométrica 7λ de Dorofeev et al.(2000); e prevalece como o estado da arte na engenharia.

Baraldi et al.(2007) realizam estudo semelhante para um prédio de um reator EPR (*European Pressurized Reactor*) com volume total de $75.400m^3$; aplicando dois códigos diferentes para dispersão e aceleração de chama. Ambos com seus respectivos modelos de combustão limitados por taxa de mistura turbulenta: CFX (EBU, *Eddy Break-Up*) e REACFLOW (EDC, *Eddy Dissipation Concept*). Baraldi et al.(2007) simularam cenários dentro deste edifício, variando a posição de vazamento para a dispersão, posição e tempo de ignição, e medidas mitigadoras como abertura de câmaras para diluir a pluma de hidrogênio. São notadas diferenças quantitativas de elevação de pressão e perfis de temperatura entre os dois códigos utilizados. Cientes das limitações de sua modelagem, Baraldi et al. apresentam seus resultados como sendo qualitativos.

Quase uma década após, o poder computacional disponível continua insuficiente para resolver geometrias completas com várias centenas de metros cúbicos em volume, em contraste com o detalhe requerido para tratar a aceleração de chama em pequenas escalas, como passagens estreitas e detalhes geométricos localizados.

2.10 Desempenho dos modelos clássicos de combustão turbulenta

Os artigos de Breitung et al.(2005) e Scholtyssek et al.(2003); bastante semelhantes em seu conteúdo, são referentes ao projeto de pesquisa HYCOM/HySafe, descrito por Reinecke et al.(2011) e Thomas et al.(2011), e firmado entre vários centros de pesquisa. Seu objetivo foi estabelecer uma base experimental comum para comparar códigos de simulação da combustão do hidrogênio no cenário de acidente após derretimento do núcleo do reator. Um cenário mais severo que o acidente de base de projeto, a exemplo do ocorrido em Fukushima em 2011 e apresentado por Braun (2011).

O artigo de Breitung et al.(2005) faz a descrição de testes em média escala: tubos circulares com obstáculos anulares, variando a concentração de hidrogênio e razão de bloqueio; e larga escala na instalação RUT; e apresenta os principais resultados de comparação entre os códigos selecionados: TONUS (CEA Comissariat a l'Energie Atomique); REACFLOW (JRC Joint Research Centre Ispra); COM3D (FZK Forschungzentrum Karlsruhe); CREBCOM (KI Kurchatov Institute); dentre outros. Resultados tais como pressões e temperaturas máximas em pontos selecionados, foram concordantes entre os códigos. Por outro lado, resultados dinâmicos como elevação da pressão e velocidade da chama, apresentaram significante dispersão entre códigos e também com os experimentos de referência, a exemplo do mc043 no artigo de Kotchourko (2005). Breitung et al.(2005) atribuem a imprecisão constatada à não-uniformidade da mistura, que é problemática para os códigos testados; porém conformam-se que o conjunto experimental construído servirá para calibrações futuras e sugerem que um elemento de malha com volume $1m^3$, para o cálculo de combustão e fluidodinâmica, pode ser aceitável para calcular cargas estruturais sobre o concreto das instalações.

Neste ponto, cabe uma constatação importante sobre os modelos de combustão implementados. Os códigos selecionados apresentam variações de apenas dois modelos de combustão: incêndio em floresta (B0B, *Forest Fire*); ou queima limitada por taxa de mistura turbulenta (EBU, *Eddy Break-Up*):

- CREBCOM (B0B).
- TONUS (EBU e B0B);
- REACFLOW (EBU) ;
- COM3D (EBU);

Num outro exercício de comparação entre códigos, pertencente a García et al.(2010), é simulada explosão de um hemisfério com 20 m de diâmetro, contendo uma mistura estequiométrica hidrogênio-ar, em campo aberto e à condição atmosférica (98,9 kPa e 10°C). O experimento havia sido realizado pelo Fraunhöfer Institut für Chemische Technologie (1983), e os dados coletados foram utilizados comparar o desempenho de sete códigos diferentes, dentro do contexto do projeto HySafe:

- AutoReaGas (correlações proprietárias);
- GCX-FLACS (*beta flame*);
- NH-FLACS (*beta flame*);
- CAST3M (B0B);

- COM3D (B0B);
- REACFLOW (EBU);
- FLUENT (Equação-G);

Os três primeiros códigos desta segunda lista são ajustados para segurança industrial com hidrocarbonetos, não tiveram bom desempenho. Isto, observado que para García et al.(2010), estimar as pressões máximas por um fator de 0,5 a 2, é um bom desempenho. A dispersão encontrada também é atribuída, por estes autores, a fatores diversos, como tamanho do domínio e gradientes de refinamento da malha.

Os códigos remanescentes na lista são novamente o incêndio em floresta (B0B) e queima limitada por mistura turbulenta (EBU). O último é baseado numa equação de progresso da combustão (Equação-G), tendo sido utilizado por Molkov et al. (2007) para o experimento em questão. Contudo, a velocidade de chama utilizada por Molkov et al. (2007) não vem de correlações, mas um argumento de auto similaridade da matemática fractal, para estimar a velocidade de chama a partir de uma taxa de aumento de superfície. Estes quatro últimos códigos, que são mais utilizados na indústria nuclear, foram rodados com densidade dez vezes maior de elementos de malha que os códigos para hidrocarbonetos. Em contrapartida tiveram desempenho bastante satisfatório, prevendo com boa aderência curvas dinâmicas de posição da frente de chama no tempo e elevação da pressão no tempo. Infelizmente, a queda de pressão após a passagem da onda de expansão sobre os pontos de sensoriamento não foi tão aderente. Segundo García et al.(2010) e Molkov et al.(2007) os sensores todos provavelmente foram danificados, não tendo retornado à leitura de pressão ambiente após o experimento. Disto depreende-se que as leituras das elevações de pressão eram confiáveis apenas até a passagem da frente de chama.

O modelo de incêndio na floresta (B0B) é uma calibração que objetiva cálculos rápidos, fornecendo uma estimativa majorada dos danos. Por outro lado, a taxa de queima limitada pela mistura turbulenta (EBU) é um modelo fisicamente mais consistente, pois em tese torna-se mais acurado com o refinamento de malha. Além disto, não requer passos de tempo tão reduzidos como na simulação com a lei de Arrhenius.

Entretanto, dado o porte e a escala das instalações nucleares e o escoamento a alta velocidade, a simulação numérica EBU terá uma tensão de cisalhamento elevada nas paredes. Pois devido ao baixo número de elementos nas fronteiras sólidas, EBU poderá ocasionar uma aderência da chama incompatível com a realidade. Isto ocorre porque a taxa de queima/mistura é estimada da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta ϵ , proporcional à taxa de cisalhamento nas paredes. Este problema será resolvido quando o poder computacional disponível for suficiente para resolver a camada limite e separação de escoamento em pequenas passagens e detalhes geométricos, também requerendo uma revisão das premissas da taxa de queima. De certa forma, isto implica a necessidade de resolução de grandes escalas (*Large Eddy Simulation*) para algumas dezenas de cenários acidentais. Neste ínterim, há três alternativas plausíveis: continuar a simular com modelos calibrados com escalas relevantes sub-resolvidas e conviver com as incertezas inerentes; estudar rigorosamente fenômenos bastante simples e bem definidos, mas procedendo de forma bastante restrita com aplicações industriais, por exemplo através de números adimensionais; ou adotar um modelo de combustão menos sensível à discretização grosseira em paredes sólidas, com custo computacional aceitável para geometrias complexas.

Sathiah et al.(2012, 2015) exploram a terceira opção, tendo selecionado o modelo de velocidade de chama turbulenta de Zimont, uma variação da equação-G com a correlação de Zimont (2000, 1998); e uma resolução baseada na densidade e modelo de turbulência $k - \epsilon$; com o qual passam a efetuar testes de convergência numérica e aderência a experimentos controlados de pequena a média escala.

A implementação de Sathiah et al.(2012) é construída sobre o código FLUENT, com refinamento dinâmico adaptativo de malha. A sequência de artigos documenta o sucesso da implementação na reprodução de resultados dinâmicos (curvas de elevação de pressão e posição da chama), diferindo apenas por um atraso de fase com as curvas do experimento ENACCEF de Chaumeix e Bentaib (2011), de pequena-média escala, de aceleração de chama num tubo vertical (de 3,3 metros de comprimento, e 154 mm de diâmetro; terminando numa câmara cilíndrica de 1,7 metro de comprimento e 738 mm de diâmetro). As decisões sobre a construção ou modificação do código de Sathiah et al.(2012) são justificadas pelas aderências aos experimentos.

Todavia, há uma reserva em relação à escolha inicial pelo modelo de Zimont. Em especial pelo fato desta correlação ter sido originalmente calibrada para aplicações subsônicas (queimadores de Bunsen, câmara de combustão de turbinas a gás, e posteriormente estendida para motores acionados por centelha); e não possuir um argumento dimensional claro para o expoente $\frac{1}{4}$ do número de Damköhler, nem para uma função de extinção de chama, que modula o formato da chama.

Menos preocupados com validações incrementais, mas na mesma linha do termo fonte determinado pela velocidade de chama turbulenta, Velikorodny et al. (2015) apresentam o código EUROPLEXUS desenvolvido no CEA, Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives; o qual resolve as equações de Euler, e uma correlação de velocidade de chama turbulenta para uma variável de progresso propagada de forma cinemática com a Equação-G. O código foi inicialmente proposto para calcular estimativas conservadoras de danos físicos, sem resolver explicitamente a chama. Porém tendo sido calibrado de tal forma, que mesmo resolvendo as equações de Euler (ao invés das equações de Navier-Stokes), reporta notável aderência em respostas dinâmicas (posição da chama e elevação de pressão) para duas geometrias de média escala (uma destas sendo o ENACCEF), e mais de uma dezena de experimentos no RUT. O artigo apresenta estudo de convergência de malha (para elementos com lados iguais a 10, 20 e 40 cm), além da distribuição dos regimes validados sobre um diagrama de Borghi. Um diferencial em relação a outras implementações, é que a velocidade de chama é definida como a soma da velocidade do gás não-queimado com a velocidade da chama turbulenta da correlação de Bradley et al. (1992), implementando a invariância galileana na equação-G, porém sem maiores justificativas desta alteração em relação à modelagem original de Peters (1999).

Apesar do bom desempenho, há dois pontos importantes a serem observados neste caso: as equações de Euler não possuem tensões viscosas, e portanto não seriam adequadas para prever a separação de escoamento e o aumento de superfície da chama. O segundo ponto é a utilização de um fator de escala, a princípio arbitrário, o qual deve ser multiplicado pelo espaçamento de malha, para obtenção da escala de comprimento integral da turbulência. Por sua vez, a ser utilizada na correlação de velocidade da chama, além de mais uma correção aplicada sobre o número de Lewis. Velikorodny et al.(2015) planejam uma codificação da fração de mistura em seu código, para simular a combustão parcialmente misturada, o qual poderá vir a constituir uma importante ferramenta de projeto. Entretanto, o código deveria simular as equações de Navier-Stokes, e deveria ser realizada análise da convergência de malha inicialmente sem os fatores de ajuste, para então justificá-los. Ações sem as quais não é possível defender a ampla utilização deste código em problemas de combustão na área de segurança.

2.11 Experimentos de aceleração de chama de média escala em túneis obstruídos

Os experimentos de Johansen e Ciccarelli (2009, 2010) foram bastante detalhados, possuindo filmagem de alta velocidade com Schlieren, em duas vistas perpendiculares. Consistiram na explosão dentro de túnel fechado, de seção prismática e com interposição de obstáculos regularmente espaçados. As razões de bloqueio (BR, fração da área obstruída para a passagem da chama sobre a área total da seção do túnel) foram três: 0,33; 0,50 e 0,67, com a maior velocidade de chama ocorrendo na razão de bloqueio 0,33.

Johansen e Ciccarelli (2009) montaram o túnel com 2,44 m de extensão, com quatro compartimentos metálicos modulares, de seção quadrada com 7,6 cm de lado, com 32 obstáculos. A mistura inflamável é metano-ar estequiométrica, inicialmente a 47kPa (absoluto) e 20°C. A aquisição de dados foi feita através de sensores de pressão, detectores de ionização e de filmagem de alta velocidade em janelas laterais e superiores em cada compartimento. É grande a riqueza de detalhes na captura da difração e interferência de ondas, e no desenvolvimento das estruturas vorticais; com o avanço da chama em cada compartimento delimitado por obstáculos adjacentes. A influência da variação das razões de bloqueio, o qual tem efeito sobre a aceleração, pode ser vista já nos instantes iniciais dentro do primeiro módulo, na figura 2.5. Uma maior constrição se traduz em frentes de chamas mais afiladas e maior tempo necessário para observar combustão completa nas câmaras já percorridas pela frente de chama.

Na continuação, Ciccarelli et al.(2010) aumentaram em 50% a extensão do túnel, para seis compartimentos, no total de 3,66 m e 48 obstáculos; para verificar diferenças nas curvas de aceleração de chama, com a influência do comprimento fechado em ambas as extremidades. As razões de bloqueio 0,50 e 0,67 mantiveram suas velocidades nos patamares de 700 e 600 m/s nas figuras 2.6b e 2.6c. Porém, no experimento com bloqueio de 0,33 na figura 2.6a, a velocidade saltou do patamar de 650 m/s para 850 m/s, e velocidades oscilantes ainda mais altas na curva verde de Schlieren obtida da filmagem de alta velocidade; sugerindo a ocorrência de um escoamento estrangulado (*choked flow*) na comparação com a velocidade do som de 888 m/s na mistura inflamável à condição inicial. As velocidades mais altas de BR 0,50 e 0,67 nos instantes iniciais podem ser explicadas por um escoamento incompressível, quando a chama acelera através de uma restrição de área. Já as velocidades mais altas de BR 0,33 após 2 m percorridos, podem ser atribuídas devidas ao maior espaço disponível para expansão e aceleração dos gases no regime sônico.



Figura 2.5: Esquemático do efeito da razão de bloqueio de área BR na área total da chama. Campo de visão inclui posição de ignição até quarto obstáculo, com a ponta da frente de chama localizada entre os obstáculos 3 e 4 para cada BR, Johansen e Ciccarelli (2009).

Nas três figuras 2.6 (a, b e c), são reportadas linhas verdes oscilantes, provenientes do cálculo de velocidade de deslocamento a partir de imagens Schlieren, nas janelas de cada módulo. Nota-se o contraste destas curvas contra a regularidade das curvas pretas em Ciccarelli et al.(2010) até 3,6 m; e vermelhas em Johansen e Ciccarelli (2009) até 2,4 m; obtidas com os detectores de ionização, que por serem em menor número, capturam apenas a média destas oscilações. As barras de erro tem altura entre 100 e 150 m/s no caso BR 0,33, sendo muito menores para BR 0,50 e 0,67.



Figura 2.6: Velocidades de deslocamento de chama versus distância percorrida, com razão de bloqueio de área (BR) 0,33 (a, acima); 0,50 (b, ao meio); e 0,67 (c, abaixo). A curva vermelha é do experimento de Johansen e Ciccarelli (2009); a curva preta pertence ao mesmo experimento aumentado em 50% em comprimento, por Ciccarelli et al.(2010). A curva verde mostra as oscilações da velocidade, inferida através de fotografia de alta velocidade.

Johansen e Ciccarelli (2013) realizaram simulações numéricas de grandes escalas (*Large Eddy Simulation*, na figura 2.7) com o modelo de chama coerente Boger et al.(1998), baseado numa equação para variável de progresso, com termo fonte fechado por uma segunda equação de transporte para a densidade de superfície de chama. Estas simulações numéricas foram realizadas apenas para o primeiro módulo e com velocidades de chama de até 80 m/s, resultando em boa aderência assintótica com os dados experimentais nesta fase de aceleração de chama; quase linear com a distância percorrida até 25 cm do percurso, apenas perturbada pela passagem pelos obstáculos. Este é um indicativo de que o modelo de chama coerente com a resolução de grandes escalas é acurado para aceleração de chama a baixas velocidades.



Figura 2.7: Contornos da variável de progresso c na simulação de Johansen e Ciccarelli (2013), utilizando modelo de chama coerente (transporte da densidade de superfície) e resolução de grandes escalas.

Entretanto, a reprodução numérica da dinâmica da aceleração de chama para velocidades mais altas permanece um desafio. Kessler et al.(2010), utilizando a mesma técnica de malha adaptativa de Gamezo et al.(2008), realizou simulações bidimensionais com boa aderência até a faixa de 600 m/s para razão de bloqueio 0,33; após a qual o experimento estabelece um patamar nesta velocidade por mais meio metro de curso; enquanto que a velocidade de chama na simulação continua a aumentar, e sem indicação de estabilização no patamar limite de 900 m/s do experimento, ver figura 2.8.



BR = 0,33

Figura 2.8: Velocidades de deslocamento de chama versus distância percorrida, para experimento de Johansen e Ciccarelli (2009 e simulação de Kessler et al.(2010).), com razão de bloqueio de área (BR) 0,33. A curva da simulação com malha adaptativa (AMR) é colocada com a mesma curva experimental vermelha da figura 2.6, Kessler et al.(2010)

Para o modelo proposto na tese, a influência da variação da estequiometria é um ponto importante a ser investigado, e experimentos relacionados são os de Kuznetsov et al.(2002), os quais precederam Johansen e Ciccarelli (2009) e Ciccarelli et al.(2010), porém também com a participação de Ciccarelli. Estes foram baseados em explosões dentro de tubos com seção circular e obstáculos regularmente espaçados de diâmetros 520 e 174 mm, com comprimento de 12 metros, fechados na extremidade de ignição e abertos na outra ponta. A proporção ar-metano é variada, resultando em diferentes razões de expansão de gás.



Figura 2.9: Velocidades de deslocamento de chama versus distância percorrida, para experimento de Kuznetsov et al.(2002), em tubo obstruído com razão de bloqueio (BR) 0,3, e diâmetros 520 mm (a, acima) e 174 mm (b, abaixo), variando-se a concentração de metano na mistura metano-ar, Kuznetsov et al.(2002).

Na figura 2.9a, para o tubo de diâmetro 520 mm (BR 0,3), é possível notar dois grupos de curvas: o grupo com velocidades mais altas entre 1300 e 1500 m/s, possui concentrações de metano mais próximas do valor estequiométrico de 9,5% (curvas 9,5%, 10,5% e 12%); enquanto que concentração mais alta (13,5%) ou mais baixa (7% e 8%) estão agrupadas numa velocidade mais baixa de 900 m/s. O fato, de a velocidade ser mais elevada na condição estequiométrica, é compatível com a maior expansão dos gases queimados; pois minimiza-se a espécie deficitária, seja esta combustível ou oxidante.

Já no diâmetro menor de 174 mm (BR 0,3), na figura 2.9b, as curvas não possuem uma separação tão clara, indicando que não há espaço físico para o desenvolvimento característico de cada chama; ou seja, com a recorrência regular de separações de escoamento, e reflexões/interferências de onda. Ainda, conforme esperado, as curvas de menores velocidades possuem concentrações de metano mais distantes da estequiométrica (6,5%, 12% e 13%), na comparação com as de maiores velocidades (9,5% e 11%). Há duas curvas diferentes com a mesma concentração de 9,5%, evidenciando uma componente probabilística na fase e amplitude das oscilações de velocidade, para passagens estreitas.

Existe uma regularidade aparente e inesperada na figura 2.9a, levando-se em consideração as altas velocidades desenvolvidas, especialmente na posição 10 m com grande elevação da velocidade para três curvas. Kuznetsov et al.(2002) não apresentam barras de erros, tornando difícil julgar esta regularidade. Uma possibilidade que pode ser verificada, é a influência de um espaçamento dos sensores mantendo a mesma posição relativa com os obstáculos, o que captaria a frente de chama aproximadamente na mesma fase na entrada de cada câmara, melhorando o aspecto da curva de aceleração.

A coleção de tópicos tratados mostra que os modelos clássicos da combustão pré-misturada são muito importantes na análise de segurança de instalações nucleares. A despeito das limitações destes modelos, um número apreciável de códigos de simulação já é utilizado; e suas incertezas de calibração frequentemente implicam em majorar estimativas de danos físicos. Os trabalhos nesta linha de pesquisa visam reduzir as incertezas de três modos: implementando ajustes em modelos e códigos; realizando exercícios de simulação e comparação entre os códigos; e arquitetando experimentos de validação. Canais com obstáculos são responsáveis pelo desenvolvimento gradual de altíssimas velocidades de chama, constituindo uma importante classe de experimentos de referência para estudo e validação de novos modelos de combustão.

Capítulo 3

Modelo de combustão modificado

3.1 Invariância galileana: a distinção entre velocidade da chama e a velocidade do fluido

Seja uma equação de propagação de advecção pura da fase ϕ :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + V \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0.$$
(3.1)

A velocidade de propagação V da fase ϕ é distinta da velocidade do fluido. Sendo a primeira velocidade referente ao transporte da fase ϕ ; e a segunda ao deslocamento do meio onde ϕ se propaga. A equação 3.1 não considera a velocidade do meio.

Para obter a velocidade da fase ϕ em relação a um referencial inercial fixo, a velocidade do meio deve ser somada à velocidade V de propagação de ϕ através deste meio, conforme a regra de adição de velocidades galileana.

Observado este fato, faz-se um paralelo com a combustão:

A propagação da frente de chama pré-misturada pode ocorrer independentemente de qualquer movimentação da mistura combustível, sendo naturalmente identificável como a propagação de ϕ , o deslocamento do equilíbrio químico, através do meio que é a mistura inflamável.

Entretanto, se o gás queimado expandir-se, o meio de propagação possuirá velocidade não-nula, e a equação a descrever a propagação da ocorrência da reação deverá considerar também esta velocidade.

3.2 Pistonamento: influência da expansão dos gases na equação da variável de progresso

Na terminologia da combustão, substâncias químicas são usualmente chamadas de espécies químicas. Se forem reagentes ou produtos, podem também ser chamados de escalares reativos.

Os modelos clássicos de combustão pré-misturada usualmente definem uma variável de progresso c como sendo uma temperatura reduzida, variando entre zero e a unidade. Quando assume-se a igualdade das difusividades térmica e das espécies (número de Lewis unitário), a variável de progresso pode ser relacionada à espécie reagente mais deficitária, como o fator limitante que governa a queima. Isto reduz a modelagem, de dezenas a centenas de espécies e com centenas a milhares de reações parciais, a apenas uma equação escalar para a combustão pré-misturada.

Entretanto, ao simplificar a coleção completa de equações para apenas uma, os modelos clássicos de combustão pré-misturada também assumem as hipóteses de gás ideal e do escoamento incompressível. Considera-se que a expansão dos gases ocorre apenas na superfície da chama, a uma razão σ conhecida; e que no restante do campo de escoamento, seja no lado dos reagentes ou dos produtos, não há variações de densidade.

A hipótese de gás ideal é frequentemente utilizada para ter-se uma equação de estado simples, mesmo em modelos com equações para as numerosas espécies. Já a hipótese de incompressibilidade, válida para escoamentos subsônicos, torna possível resolver uma única equação escalar na variável de progresso c, e determinar os campos da pressão, da temperatura e da composição química. Pois sendo a densidade constante, a pressão e a temperatura são diretamente proporcionais.

Nesta seção desenvolve-se um novo modelo de combustão pré-misturado, a partir das equações fundamentais de conservação das espécies químicas, no qual o efeito da expansão dos gases é automaticamente considerado ao reverter-se a hipótese de incompressibilidade. O aparecimento de um termo adicional é responsável por adicionar a velocidade dos gases em expansão à velocidade de propagação da chama.

Seja uma equação de transporte, assumindo difusividades D^q iguais para as q-espécies reativas, na combustão pré-misturada descrita por uma única reação química sem reações intermediárias. Num referencial fixo, para frações mássicas de escalares reativos Y_q :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_q) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j Y_q) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho D \frac{\partial Y_q}{\partial x_j}) + \omega^q \qquad q = 1, 2...N.$$
(3.2)

A fração mássica é a soma das frações mássicas do q-ésimo escalar reativo, nas regiões onde a combustão já ocorreu (variável de progresso c = 1) e onde ainda não ocorreu (c = 0); tal que ρY_q é uma ponderação de Y_q no elemento de volume, considerando a expansão do volume após a passagem da chama:

$$\rho Y_q = c \,\rho_b \, Y_q^b + (1 - c) \,\rho_u Y_q^u \,, \tag{3.3}$$

$$\rho Y_q = c \left(\rho_b Y_q^b - \frac{\rho_u}{\rho_b} \rho_b Y_q^u\right) + \rho_u Y_q^u \,, \tag{3.4}$$

onde $\sigma = \frac{\rho_u}{\rho_b}$ é a razão de expansão dos gases devido à queima, resultando numa relação simples entre as frações mássicas Y_q com a variável de progresso c:

$$\rho Y_q = c \left(\rho_b Y_q^b - \sigma \rho_b Y_q^u\right) + \left(\rho_u Y_q^u\right). \tag{3.5}$$

Para uma combustão pré-misturada, as densidades da mistura $\rho_u \in \rho_b$, de antes e após a queima são constantes e conhecidas.

Considerando-se a composição química homogênea e estequiometria fixa, as frações mássicas $Y_q^u \in Y_q^b$, de antes e após a queima, também são constantes e conhecidas, e a coleção de equações de transporte 3.2 para as espécies reativas fica reduzida a apenas uma equação na variável de progresso c, através da seguinte interpolação:

$$\rho Y_q = c \underbrace{\left(\rho_b Y_q^b - \sigma \rho_b Y_q^u\right)}_{\text{cte}} + \underbrace{\left(\rho_u Y_q^u\right)}_{\text{cte}}, \qquad (3.6)$$

sendo constantes os termos contidos nos parênteses.

Esta é uma equação ligeiramente diferente da utilizada e discutida por Zimont (2000) no seu modelo de combustão de velocidade de chama turbulenta, na qual as frações mássicas não são multiplicadas pelas respectivas densidades.

Substituindo-se ρY_q da equação 3.6 em 3.2, a constante aditiva destacada na equação 3.6 é zerada pelos operadores diferenciais; enquanto que a constante multiplicativa de c é cancelada, pois aparece exatamente uma vez em todos os termos em c:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (v_j c) = \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho D \, \frac{\partial}{\partial x_j} (\frac{c}{\rho})] + \frac{\omega^c}{\rho} \,. \tag{3.7}$$

Os gases expandem por diferentes medidas e taxas, em diferentes localidades no campo de escoamento. A aplicação da equação 3.6 é necessária para preservar a invariância galileana em cada célula computacional, no caso de mudança do referencial fixo considerado para outro em movimento.

Algumas manipulações podem ser efetuadas para trazer a equação 3.7 para um formato mais reconhecível. Multiplica-se a equação 3.7 por ρ , em seguida somando-se a esta a equação da continuidade ponderada por c:

$$\rho \frac{\partial c}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x_j} (v_j c) = \rho \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho D \frac{\partial}{\partial x_j} (\frac{c}{\rho})] + \omega^c, \qquad (3.8)$$

$$\rho \frac{\partial c}{\partial t} + \underbrace{\rho \frac{\partial}{\partial x_j}(v_j c)}_{c \times \text{ eq. continuidade } = 0} = \rho \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho D \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{c}{\rho}\right)\right] + \omega^c, \quad (3.9)$$

expande-se:

$$\rho \frac{\partial c}{\partial t} + \underbrace{\rho v_j \frac{\partial c}{\partial x_j} + \rho c \frac{\partial v_j}{\partial x_j}}_{c \times \text{ eq.continuidade } = 0} + \underbrace{c \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho c \frac{\partial v_j}{\partial x_j} + v_j c \frac{\partial \rho}{\partial x_j}}_{c \times \text{ eq.continuidade } = 0} = \rho \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho D \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{c}{\rho} \right) \right] + \omega^c ,$$
(3.10)

e utiliza-se a expansão/contração:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j c) = \rho v_j \frac{\partial c}{\partial x_j} + \rho c \frac{\partial v_j}{\partial x_j} + v_j c \frac{\partial \rho}{\partial x_j}.$$

Através destas manipulações aparecem dois termos com o divergente da velocidade. A contração dos produtos absorve o primeiro divergente para dentro da derivada total de ρc , restando o segundo que fica como um termo adicional:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j c)}_{\text{derivada total de }\rho c} + \underbrace{\rho c \frac{\partial v_j}{\partial x_j}}_{\text{termo adicional}} = \rho \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho D \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{c}{\rho}\right)\right] + \omega^c , \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j c) = \rho \frac{\partial}{\partial x_j}[\rho D \frac{\partial}{\partial x_j}(\frac{c}{\rho})] + \omega^c \underbrace{-\rho c \frac{\partial v_j}{\partial x_j}}_{\text{termo adicional}} .$$
(3.12)

Emergindo disto uma estrutura de equação comum aos modelos Bray-Moss-Libby, CFM, BVM/TFC. As diferenças entre os modelos ocorrendo no fechamento dos termos difusivo e fonte.

Há também um termo adicional $-\rho c \partial_j v_j$, diretamente relacionado à compressibilidade do escoamento (proporcional ao divergente da velocidade), e portanto à expansão do gás queimado. Ademais, o divergente da velocidade é um invariante galileano, pois é a contração do tensor gradiente de velocidade do fluido, o qual independe do referencial.

A hipótese de incompressibilidade não foi utilizada nesta derivação. Mas caso fosse invocada, as densidades $\rho_u \in \rho_b$ deveriam ser igualadas na equação 3.6, e com $\rho_u = \rho_b = \rho$ o termo adicional não apareceria.

Para baixos números de Mach, desconsiderar a energia cinética não introduz erro apreciável, e a mesma dedução pode ser feita com a equação da energia, utilizando-se a temperatura T no lugar das espécies reativas Y_q nas equações 3.2 e 3.6; e temperaturas $T_b \in T_u$ (do gás queimado e não-queimado) na equação 3.6, no lugar de $Y_q^b \in Y_q^u$.

Desta forma, para baixas velocidades, a resolução da variável de progresso c permite determinar: o campo de composição química, através das espécies reativas na equação 3.6; a temperatura, na substituição de Y por T na 3.6; e a pressão, através da equação de estado. Importante notar que este procedimento rende maior acurácia que os modelos clássicos, pois a densidade ρ pode assumir valores intermediários entre $\rho_b e \rho_u$ e a pressão não está presa diretamente à temperatura.

Para altos números de Mach, a energia cinética deve necessariamente ser considerada. Ainda demandando-se as equações de energia e de estado para determinar a temperatura e a pressão.

Na próxima seção será demonstrado que a equação de energia pode ser convertida numa equação para a pressão, a qual é identificável como uma equação dual da equação na variável de progresso. Também será apresentada uma outra simplificação para altos números de Mach.

3.3 Equação da energia e a equação para pressão

Nesta seção é deduzida uma equação para pressão. Para tornar mais clara a derivação e realçar a comparação com a equação da variável de progresso c, isto será feito sem as tensões viscosas na equação de momento (equações de Euler), e sem o termo difusivo na equação de energia.

A derivação mais geral incluindo estes termos é imediata, se o termo difusivo for carregado junto a ω^e ; e as tensões viscosas junto a $v_j \frac{\partial p}{\partial x_j}$, terminando-se com as tensões viscosas, multiplicadas pela velocidade, incorporadas em ω^e nas respectivas equações a seguir.

Sejam as equações de Euler na forma não-conservativa:

$$\rho \,\frac{\partial v_i}{\partial t} + \rho v_j \,\frac{\partial v_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} \,, \tag{3.13}$$

multiplicadas pela velocidade v_i :

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{v_i^2}{2}\right) + \rho v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{v_i^2}{2}\right) = -v_i \frac{\partial p}{\partial x_i}.$$
(3.14)

Somando-se a isto, a equação da continuidade multiplicada por $(v_i^2/2)$, resulta numa expressão de transporte para a energia cinética:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\frac{1}{2}\rho v_i^2) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\frac{1}{2}\rho v_j v_i^2) = -v_i \frac{\partial p}{\partial x_i}.$$
(3.15)

Isola-se o produto entre velocidade e gradiente de pressão no lado esquerdo, e trocase o índice i por j somente neste termo:

$$v_j \frac{\partial p}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial t} (\frac{1}{2} \rho v_i^2) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\frac{1}{2} \rho v_j v_i^2).$$
(3.16)

Alterna-se para a equação da energia total, onde expande-se a o termo de pressão:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_0) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j e_0) + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(v_j p)}_{\underbrace{\underbrace{\partial x_j}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\underbrace{\partial x_j}}}_{\underbrace{\underbrace{\partial x_j}}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\underbrace{\partial x_j}}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\underbrace{\partial x_j}}}_{\underbrace{\underbrace{\partial x_j}}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\underbrace{\partial x_j}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\underbrace{\partial x_j}}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\underbrace{\partial x_j}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\underbrace{\partial x_j}}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\underbrace{\partial x_j}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\partial x_j}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\underbrace{\partial x_j}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\partial x_j} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\partial x_j}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\underbrace{\partial x_j}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\underbrace{\partial x_j}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\partial x_j}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\partial x_j} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\partial x_j}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{v_j}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\partial x_j} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{\partial x_j} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{v_j}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{v_j}} \underbrace{(v_j p)}_{\underbrace{v_j}} \underbrace{(v$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_0) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j e_0) + \underbrace{p \frac{\partial v_j}{\partial x_j} + v_j \frac{\partial p}{\partial x_j}}_{-} = \omega^e \,. \tag{3.18}$$

O termo direito recém-expandido, produto entre velocidade e gradiente de pressão, é substituído pela expressão de transporte da energia cinética 3.16:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_0) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j e_0) + p \frac{\partial v_j}{\partial x_j} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial t}(\frac{1}{2}\rho v_i^2) - \frac{\partial}{\partial x_j}(\frac{1}{2}\rho v_j v_i^2)}_{=v_j \frac{\partial p}{\partial x_j}} = \omega^e.$$
(3.19)

Coleta-se os termos negativos de energia cinética com a energia total, no tempo e no espaço; remanescendo apenas a diferença, que é apenas a energia interna:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_0) - \frac{\partial}{\partial t}(\frac{1}{2}\rho v_i^2)}_{\text{tempo}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j e_0) - \frac{\partial}{\partial x_j}(\frac{1}{2}\rho v_j v_i^2)}_{\text{espaço}} + p\frac{\partial v_j}{\partial x_j} = \omega^e, \quad (3.20)$$

a equação de energia fica:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j e) + p \frac{\partial v_j}{\partial x_j} = \omega^e , \qquad (3.21)$$

onde:

$$e = e_0 - \frac{1}{2}v_i^2. aga{3.22}$$

A hipótese de gás ideal permite fazer as seguintes simplificações:

$$\rho e = \rho c_v T = \frac{\rho RT}{\gamma - 1} = \frac{p}{\gamma - 1}.$$
(3.23)

Substitui-se a energia interna e pela pressão da equação 3.23, na equação de energia 3.21:

$$\frac{1}{\gamma - 1}\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{\gamma - 1}\frac{\partial}{\partial x_j}(v_j p) + p\frac{\partial v_j}{\partial x_j} = \omega^e, \qquad (3.24)$$

multiplica-se a equação inteira por $(\gamma - 1)$, e expande-se o termo advectivo:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (v_j p) + (\gamma - 1) p \frac{\partial v_j}{\partial x_j} = (\gamma - 1) \omega^e , \qquad (3.25)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + v_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + p \frac{\partial v_j}{\partial x_j} + (\gamma - 1) p \frac{\partial v_j}{\partial x_j} = (\gamma - 1) \omega^e , \qquad (3.26)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + v_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \underbrace{p \frac{\partial v_j}{\partial x_j} + (\gamma - 1) p \frac{\partial v_j}{\partial x_j}}_{(3.27)} = (\gamma - 1) \omega^e.$$

Agrupando os termos da pressão e divergente da velocidade, indicados na eq.3.27, resulta a equação para a pressão:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + v_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \underbrace{\gamma p \frac{\partial v_j}{\partial x_j}}_{\text{compressibilidade}} = (\gamma - 1)\omega^e \,. \tag{3.28}$$

A equação resultante 3.28 é equivalente à equação de energia sem a viscosidade e sem difusividade térmica. Se colocada junto às equações de conservação de massa e de momento, compõe o conjunto de equações necessárias para obter a solução clássica de Chapman-Jouguet para o regime detonado.

Para altos números de Mach, a frente de chama é bem localizada e os gradientes temperatura, pressão e espécies estão sobrepostos, de forma que a equação 3.28 torna-se uma equação única para resolver simultaneamente estas quantidades. Este é o papel análogo ao da equação da variável de progresso 3.29 (repetição da eq.3.11), para resolver temperatura, pressão e espécies, a baixos números de Mach.

Comparando-se a equação 3.28 para a pressão e a 3.29 para a variável de progresso, nota-se que o termo destacado no lado esquerdo de ambas é o produto da quantidade transportada multiplicada pelo divergente da velocidade. Além disto, o termo da equação 3.28 possui um fator γ dos gases perfeitos, que a equação 3.29 não possui.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j c) + \underbrace{\rho c \frac{\partial v_j}{\partial x_j}}_{\text{termo adicional}} = \rho \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho D \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{c}{\rho}\right)\right] + \omega^c \,. \tag{3.29}$$

A equação 3.28 permite resolver simultaneamente temperatura, pressão e espécies a altas velocidades, como a propagação da chama no regime detonado, por compressão mecânica dos gases reagentes; enquanto a equação 3.29 resolve as mesmas quantidades a baixas velocidades, com a propagação por difusão de calor e espécies no regime deflagrado.

A velocidade de propagação resultante da equação 3.28 é a velocidade de propagação acústica, superior à velocidade de propagação da equação 3.29 na condição incompressível, pelo fator $\gamma^{1/2}$.

Para baixos números de Mach, a variável de progresso na equação 3.29 relaciona-se:

- às espécies reativas, através de $c \sim \rho Y_q$;
- à energia interna e à temperatura, através de $c \sim \rho Y_q \sim \rho e \sim \rho T$, pois sem a energia cinética as equações de Y_q e T são iguais;
- à pressão, através de $c \sim \rho T \sim p$.

Para altos números de Mach, a pressão na equação 3.28 relaciona-se:

- à temperatura, através de $p \sim \rho T$;
- às espécies reativas e à variável de progresso, através de p ~ ρT ~ ρY_q ~ c, pois apesar das equações de Y_q e T diferirem pela energia cinética, admite-se que os gradientes de ambas são bastante pronunciados e sobrepostos, de modo que o erro é pequeno.

Para o intervalo entre estes extremos, a equação de energia na temperatura T possui um termo de energia cinética a mais que as equações para as espécies reativas Y_q , e as equações 3.29 e 3.28 são necessariamente independentes. A equação na variável de progresso c pode ser utilizada para computar a composição espacial Y_q , enquanto que a pressão pode ser utilizada para computar a temperatura através da equação de estado.

Para qualquer número de Mach:

- a variável de progresso na equação 3.29 relaciona-se às espécies reativas, através de $c \sim \rho Y_q$;
- a pressão na equação 3.28 relaciona-se à temperatura e à energia interna, através de $p \sim \rho T \sim \rho e$; e à energia total e_0 , somando-se ρe e $1/2 \rho v_i^2$.

No exemplo de uma deflagração, a chegada da frente de chama é atrasada em relação à passagem das ondas de pressão, mostrando a coerência da independência das equações para c e p. De modo complementar, os dois extremos de velocidades apresentam as condições para interdependência das equações: a velocidades muito baixas, o campo pode ser considerado incompressível com a combustão suficientemente descrita pela equação em c; enquanto que a velocidades muito elevadas, as frentes de descontinuidade de c e p se deslocam solidárias, requerendo apenas uma equação para propagação a alta velocidade.

Para tratar de um problema geral, incluindo todo o espectro de números de Mach, é suficiente resolver as equações de continuidade, do momento, da variável de progresso 3.29 e da energia total, podendo esta última ser substituída pela equação da pressão 3.28 derivada nesta seção, contendo os termos viscosos e difusivo no termo fonte.

3.4 Limite do modelo proposto no regime permanente unidimensional e incompressível

Será analisado o limite de regime permanente para uma chama laminar na equação 3.12, repetida abaixo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j c) = \rho \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho D \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{c}{\rho}\right)\right] + \omega^c \underbrace{-\rho c \frac{\partial v_j}{\partial x_j}}_{\text{termo adicional}} .$$
 (3.30)

No regime permanente unidimensional, o termo de variação temporal é nulo; e no referencial solidário à chama, a velocidade de chama laminar S_L deve ser debitada do termo advectivo:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j c) - \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho S_L c) = \rho \frac{\partial}{\partial x_j}[\rho D \frac{\partial}{\partial x_j}(\frac{c}{\rho})] + \omega^c - \rho c \frac{\partial v_j}{\partial x_j}.$$
(3.31)

A velocidade v_j é a velocidade do fluido em relação a um referencial convencionado fixo, independente da chama. O termo de divergente da velocidade independe do referencial e não necessita de correção.

Através da hipótese de incompressibilidade de produtos e reagentes, as densidades ρ redundantes podem canceladas dentro e fora das derivadas parciais do termo difusivo. Também assume-se que a reação que leva reagentes a produtos é única e irreversível.

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\rho(v_j - S_L)c] = \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho D \frac{\partial c}{\partial x_j}] + \omega^c - \rho c \frac{\partial v_j}{\partial x_j}.$$
(3.32)

Integrando-se na direção x_j de propagação da chama, através da espessura Γ da chama:
$$\underbrace{\rho(v_j - S_L)c}_{\text{gradiente integrado da velocidade do fluido}} = \underbrace{\left[\rho D \frac{\partial c}{\partial x_j}\right]_{\Gamma}}_{\text{difusão de }c} + \underbrace{\int_{\Gamma} \omega^c dx_j}_{\text{fonte de }c} - \underbrace{\int_{\Gamma} \rho c \frac{\partial v_j}{\partial x_j} dx_j}_{\text{gradiente de }c}, \quad (3.33)$$

$$\underbrace{\rho(\sigma S_L - S_L)c}_{c=1} - \underbrace{\rho(S_L - S_L)c}_{c=0} = \underbrace{\left[\rho D \frac{\partial c}{\partial x_j}\right]_{\Gamma}}_{\text{cte}} + \underbrace{\int_{\Gamma} \omega^c dx_j}_{\text{cte}} - \underbrace{\int_{\Gamma} \rho c \frac{\partial v_j}{\partial x_j} dx_j}_{\text{expansão do gás}}. \quad (3.34)$$

No referencial solidário à espessura da chama e com número de Mach muito inferior à unidade, os termos integrados difusivo (laplaciano) e fonte ω^c na equação 3.34 são constantes. Isto pode ser imediatamente verificado no caso de uma chama que se propaga com velocidade constante e sem expansão dos gases, fazendo-se $\sigma = 1 \ e \ \partial_j v_j = 0.$

A equação 3.34 é válida para qualquer posição de corte na espessura Γ da chama, e pode ser interpretada da seguinte forma: na interface da chama com os reagentes, existe um gradiente de c. Ao atravessar a espessura de chama Γ para o lado dos produtos, o gradiente de c é convertido num gradiente de velocidade, pois o gás queimado se expande.

No regime permanente, a frente de chama não sofre elongação nem contração na direção x_j . O termo advectivo integrado na equação 3.34 é a variação de velocidade do fluido no referencial da chama; com velocidade instantânea nula na fronteira c = 0, até a velocidade $(\sigma - 1) S_L$ em c = 1; igualada pelo termo de expansão do gás no lado direito da mesma equação.

Imediatamente após a passagem da espessura da chama Γ , na região dos produtos não há mais gradiente de c, e portanto os gases queimados não mais aceleram, seja em relação ao referencial da chama ou ao fixo. É interessante observar que a situação analisada é perfeitamente compatível com a propagação de uma chama num tubo com mistura inflamável, aberto em ambas as extremidades, e de modo que a chama possa manter uma velocidade constante enquanto os gases queimados expandem para fora do tubo. De forma análoga, se o tubo for fechado na extremidade dos produtos, os gases queimados no primeiro instante passam a ser o referencial inercial, e a chama é continuamente acelerada pela expansão dos gases recém-queimados. Isto completa a análise de consistência do modelo proposto.

3.5 Aproximação do termo divergente por uma forma advectiva

No caso de uma simulação com resolução das escalas próximas à espessura da chama, o termo $-\rho c \partial_j v_j$ na equação 3.30 é responsável por considerar a expansão de um volume elementar ao ter sua mistura queimada.

Entretanto, para simulações com espaçamento de malha maior que a espessura da chama, algum ajuste é necessário, podendo-se modelar $-\rho c \partial_j v_j$ por uma forma advectiva $-\rho v_j \partial_j c$ na direção perpendicular à superfície de chama fina, que é a direção na qual o fluxo de gases queimados expande. Esta equivalência aproximada foi mostrada na seção anterior, com a transformação de um gradiente da variável de progresso c num gradiente da velocidade do fluido, durante a passagem da espessura de chama Γ através dos reagentes.

A velocidade v_j^n , no termo adicional modelado, é estimada em cada célula computacional como a magnitude da velocidade, projetada na direção normal (superscrito n) de propagação da chama.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j c) = \rho \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho D \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{c}{\rho}\right)\right] + \omega^c \underbrace{-\alpha \rho v_j^n \frac{\partial c}{\partial x_j}}_{\text{expansão pós-queima}} .$$
(3.35)

Fazendo-se α igual à unidade, a adição de velocidades galileana é implementada, tal que a mistura em queima é deslocada pelos gases em expansão.

Efetua-se a média de Favre, considerando a mistura homogênea, e trunca-se o termo difusivo para uma forma simplificada. A difusividade de \tilde{c} sendo associada à propagação da frente de chama, através da difusão de calor e espécies.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\widetilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\widetilde{v_j}\widetilde{c}) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}D\,\frac{\partial\widetilde{c}}{\partial x_j}\,) + \overline{\omega^c} - \alpha\,\overline{\rho}v_j^n\,\frac{\partial\widetilde{c}}{\partial x_j}\,.$$
(3.36)

Utilizando-se uma correlação para a velocidade de chama turbulenta S_{τ} para o termo fonte ω^c , conforme fechamento proposto por Zimont et al.(1998):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\widetilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\widetilde{v_j}\widetilde{c}) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{c}}{\partial x_j}) - \rho_u S_T \frac{\partial\widetilde{c}}{\partial x_j} - \alpha \overline{\rho}v_j^n \frac{\partial\widetilde{c}}{\partial x_j}.$$
(3.37)

Zimont et al.(1998) justificam a presença da densidade ρ_u (ao invés de ρ) no termo fonte $\omega^c = -\rho_u S_T \partial_j c$, para balancear a taxa de consumo entre os dois lados da chama (balanço de massa no referencial da chama); quando a equação da variável de progresso é vista como uma equação de propagação não-homogênea. Desta forma, chega-se ao formato padrão do modelo de velocidade de chama turbulenta (BVM), acrescido do termo adicional de expansão de gases.

Pelo argumento dimensional de Damköhler (1940), é razoável estimar S_{T} pela soma da velocidade de chama laminar S_{L} com a escala de flutuação turbulenta de velocidade v':

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\widetilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\widetilde{v_j}\widetilde{c}) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}D\,\frac{\partial\widetilde{c}}{\partial x_j}) - \rho_u\left(S_L + v'\right)\frac{\partial\widetilde{c}}{\partial x_j} - \alpha\,\overline{\rho}v_j^n\,\frac{\partial\widetilde{c}}{\partial x_j}\,,\qquad(3.38)$$

com v' dado pela raiz quadrada da energia cinética turbulenta k (em uma das três dimensões), e um novo parâmetro n:

$$v' = \sqrt{\frac{2k}{3n}} \,. \tag{3.39}$$

O parâmetro n é uma forma de variar a proporcionalidade de $S_T \operatorname{com} v'$. Esta forma funcional simples tem apenas o propósito de estabelecer comportamentos da curva de aceleração de chama, para uma dependência linear de $S_T \operatorname{com} v'$, e facilitar distinguir os efeitos do termo adicional da expansão dos gases.

Na sequência, é interessante também substituir ρ por ρ_u no termo adicional no lado direito da equação 3.38, para facilitar a implementação em simuladores do modelo de Zimont (1998), que aceitam a utilização de expressões de S_T definidas pelo usuário. A soma de velocidades entre parênteses na equação 3.40 é diretamente colocada na expressão a ser considerada para S_T , no simulador. Torna-se também necessário uma correção do coeficiente α na equação 3.40, pois o termo adicional foi amplificado pela razão de expansão σ com a substituição de ρ por ρ_u .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\widetilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\widetilde{v}_j\widetilde{c}) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}D\,\frac{\partial\widetilde{c}}{\partial x_j}) - \rho_u\left(S_{\scriptscriptstyle L} + v' + \alpha\,v_j^n\right)\frac{\partial\widetilde{c}}{\partial x_j}\,.$$
(3.40)

Desta forma, para estequiometrias com taxa de expansão $\sigma \sim 7$, o parâmetro α deve ser reduzido do valor unitário para $\sim 0, 14$, para reter a adição de velocidades idealizada. Esta última equação 3.40 carrega a parametrização estudada na tese,

com dois mecanismos intensificadores da combustão: o efeito de pistonamento (parâmetro α), da expansão dos gases propelindo a chama para frente; e o nível de turbulência local (parâmetro n), estimado pela escala da flutuação turbulenta da velocidade v'. A associação de cada parâmetro com seu respectivo efeito físico será estabelecida na seção de resultados, e permitirá avaliar a qualidade da calibração mais adequada ao problema de aceleração de chama num canal obstruído.

3.6 Conjunto de equações do escoamento médio e modelo de turbulência a duas equações, FANS

A seguir são apresentadas as equações do escoamento médio e as modelagens da combustão pré-misturada e turbulência para as simulações.

3.6.1 Definição da média de Favre

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \,, \tag{3.41}$$

$$\overline{\rho\phi} = \overline{\rho}\tilde{\phi} + \overline{\rho\phi''} , \qquad (3.42)$$

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}} . \tag{3.43}$$

3.6.2 Conservação das espécies químicas e continuidade

Aproximação clássica de Curtiss e Hirschfelder, conforme livro de Poinsot (2005), na qual as velocidades de difusão V_j^q das espécies químicas q na direção j podem ser aproximadas por uma Lei de Fick em cada fração mássica Y_q . Quando as frações mássicas ponderadas pela densidade local são somadas para calcular a densidade, a soma de todos os fluxos difusivos resulta zero:

$$\Sigma_q \ \rho V_j^q Y_q = 0 \ , \tag{3.44}$$

bem como todos os termos fontes ω^q :

$$\Sigma_q \; \omega^q = 0 \;, \tag{3.45}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\tilde{Y}_q) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\tilde{v}_j\tilde{Y}_q) = \overline{\omega^q} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\tilde{v}_j'Y_q'') - \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}V_j^qY_q) , \qquad (3.46)$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho} \tilde{v_j}) = 0 . \qquad (3.47)$$

3.6.3 Quantidade de movimento e tensor de tensões

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{v}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{v}_j\tilde{v}_i) = \frac{\partial\overline{\tau_{ij}}}{\partial x_j} - \bar{\rho}\tilde{v}_i''\tilde{v}_j'' + \overline{\rho\Sigma_q(Y_q\,f_i^q)} \,. \tag{3.48}$$

Tensor de tensões

$$\tau_{ij} = -p \,\delta_{i,j} - \frac{2}{3} \mu \, v_{k,k} \,\delta_{i,j} + 2\mu \epsilon_{ij} \,. \tag{3.49}$$

Taxa de deformação angular

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} (v_{i,j} + v_{j,i}) , \qquad (3.50)$$

$$-\overline{\rho}\widetilde{v_i''v_j''} = 2\mu_T \widetilde{\epsilon_{ij}} - \frac{2}{3}\mu_T \, \widetilde{v_{k,k}} \, \delta_{i,j} - \frac{2}{3} \,\overline{\rho}\widetilde{k} \, \delta_{ij} \,. \tag{3.51}$$

Admite-se a hipótese de Boussinesq, de que o tensor de tensões turbulentas é proporcional ao tensor de tensões viscosas, pela razão $\frac{\mu_T}{\mu}$; onde μ_T é a viscosidade *eddy* em cada elemento computacional. A viscosidade total é soma da viscosidade molecular μ com a viscosidade turbulenta μ_T do modelo de turbulência $k - \epsilon$.

3.6.4 Equação de estado

$$p = \rho RT \Sigma_q(\frac{Y_q}{W^q}) . \tag{3.52}$$

3.6.5 Energia

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{e}_{0}) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}(\bar{\rho}\tilde{v}_{j}\tilde{e}_{0} + \tilde{v}_{j}\tilde{p}) = -\frac{\partial}{\partial x_{j}}(\bar{\rho}\tilde{v}_{j}\tilde{e}_{0}^{\prime\prime\prime} + \tilde{v}_{j}\tilde{p}^{\prime\prime\prime}) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}(\overline{q}_{j}^{\prime\prime} + v_{i}\sigma_{ij}) + \overline{\rho}\Sigma_{q}[Y_{q}(v_{i} + V_{i}^{q})f_{i}^{q}] + \overline{\dot{q}}.$$
(3.53)

Definição da energia total e_0 , como soma das entalpias de cada espécie excluído o trabalho da pressão, e acrescida a energia cinética:

$$e_0 = \Sigma_q(Y_q h^q) - \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} v_i^2 , \qquad (3.54)$$

$$h^{q} = \int_{T_{0}}^{T} c_{P}^{q} dT + \Delta h_{f,0}^{q} . \qquad (3.55)$$

Tensor de tensões viscosas σ_{ij} , igual ao tensor de tensões exceto pelo gradiente de pressão:

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} + p\,\delta ij \,. \tag{3.56}$$

São desprezados efeitos de difusão de massa por gradiente térmico (efeito Soret), e difusão térmica por gradiente de concentração (efeito Dufour):

$$q_j'' = (k + k_T) \frac{\partial T}{\partial x_j} - \rho \Sigma_q (Y_q V_j^q h^q) .$$
(3.57)

A difusividade térmica turbulenta k_{τ} é maior que a difusividade molecular k, pela mesma razão entre as viscosidades turbulenta e molecular $\frac{\mu_T}{\mu}$, obtida com o modelo de turbulência $k - \epsilon$.

Restringe-se a produção de energia por unidade de tempo e por volume, à energia liberada pela combustão, admitindo-se a hipótese de meios transparentes, nãoradiativos:

$$\dot{q} = -\Sigma_q \,\Delta h^q_{f,0} \,\omega^q \,. \tag{3.58}$$

3.6.6 Modelo de turbulência $\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{v_j}k) = P_k - \bar{\rho}\epsilon + \frac{\partial}{\partial x_j}[(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k})\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}k)], \quad (3.59)$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{v}_j\epsilon) = C_{1\epsilon}\frac{\epsilon}{k}P_k - C_{2\epsilon}\bar{\rho}\frac{\epsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j}[(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_\epsilon})\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\epsilon)], \quad (3.60)$$

$$P_k = -\overline{\rho} \widetilde{v_i'' v_j''} \, \widetilde{v_{i,j}} \,, \qquad (3.61)$$

$$\overline{\rho}\,\epsilon = \overline{\sigma_{ij}\frac{\partial v_i''}{\partial x_j}}\,,\tag{3.62}$$

$$\nu_T = \frac{\mu_T}{\overline{\rho}} = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} , \qquad (3.63)$$

$$C_{\mu} = 0,09$$
, $\sigma_k = 1,0$, $\sigma_{\epsilon} = 1,3$, $C_{1\epsilon} = 1,44$, $C_{2\epsilon} = 1,92$. (3.64)

O livro de Wilcox (1994) apresenta modificações possíveis de Zeman (1990) Sarkar et al.(1991) para tratar a compressibilidade do modelo $k - \epsilon$. Expandindo-se o tensor gradiente de velocidade nas suas partes simétrica (taxa de deformação angular) e antissimétrica (vorticidade), a taxa de dissipação ϵ da energia cinética turbulenta k pode ser decomposta numa parte solenoidal e outra dilatacional, que são proporcionais em camadas cisalhantes, mas não quando a produção de turbulência supera a dissipação.

Pelo fato de não haver um consenso sobre quais os fechamentos mais adequados no caso geral para estas duas componentes; e pela dificuldade adicional de separar efeitos oriundos destes fechamentos das próprias características dos modelos de combustão analisados, optou-se por utilizar o modelo $k - \epsilon$ padrão nas simulações da tese, com as equações do escoamento compressível e modelos da combustão pré-misturada, com a usual ponderação na densidade para todas as variáveis de campo.

3.6.7 Variável de progresso

A combustão pré-misturada é modelada através de uma equação de transporte para a variável de progresso *c*:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j c) = \rho \frac{\partial}{\partial x_j} \left[D \frac{\partial c}{\partial x_j} \right] + \omega^c , \qquad (3.65)$$

cujo termo fonte ω^c é fechado de três diferentes modos, conforme o modelo estudado: chama coerente de Boger et al.(1998), modelo de Zimont (2000) com a correlação de Peters (1999) e o modelo proposto.

No modelo de chama coerente de Boger et al.(1998), ω^c é relacionado à densidade de superfície Σ :

$$\overline{\omega^c} = \rho \left\langle s_c \right\rangle \Sigma = \rho \,\frac{\alpha_0}{\beta_0} \,\frac{\epsilon}{k} \,\tilde{c}(1 - \tilde{c}) \,, \tag{3.66}$$

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{v}_j \Sigma) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\frac{\nu_T}{\sigma_c} \frac{\partial \Sigma}{\partial x_j}) + \alpha_0 \frac{\epsilon}{k} \Sigma - \beta_0 \langle s_c \rangle \frac{\Sigma^2}{\tilde{c} (1 - \tilde{c})}.$$
(3.67)

No modelo de Zimont (2000) com a correlação de Peters (1999), a equação da variável de progresso com a velocidade de chama turbulenta S_{τ} :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j c) = -\rho_u S_T \frac{\partial c}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho D_T \frac{\partial c}{\partial x_j}), \qquad (3.68)$$

dada por:

$$S_T = S_L \left(1 + \sigma_t \right), \tag{3.69}$$

$$\sigma_t = -A \frac{L_T}{\delta} + \sqrt{\left(A \frac{L_T}{\delta}\right)^2 + B \frac{v' L_T}{S_L \delta}}.$$
(3.70)

Nos modelos de chama coerente de Boger et al.(1998) e de velocidade de chama de Peters (1999), a hipótese de incompressibilidade do escoamento, exceto na zona de reação química, torna desnecessário resolver a equação de energia para determinar os campos de pressão e temperatura, já relacionados pela equação de estado; e de espécies, relacionados à temperatura local.

No modelo proposto, a energia cinética não é desprezada, o que requer a resolução conjunta com a equação da energia total; e é considerado um termo adicional de expansão dos gases na equação da variável de progresso c, para tratar a compressibilidade:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j c) = \rho \frac{\partial}{\partial x_j} \left[D \frac{\partial c}{\partial x_j} \right] + \omega^c \underbrace{-\rho c \frac{\partial v_j}{\partial x_j}}_{\text{termo adicional}}, \qquad (3.71)$$

com a parametrização dada pelos coeficientes: α do pistonamento pela expansão dos gases; e n, uma modulação da velocidade de chama turbulenta pela flutuação turbulenta de velocidade v':

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\widetilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\widetilde{v_j}\widetilde{c}) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{c}}{\partial x_j}) - \rho_u(S_L + v' + \alpha v_j^n)\frac{\partial\widetilde{c}}{\partial x_j}.$$
 (3.72)

3.7 Problema canônico aerodinâmico

O código *Ansys CFX* foi utilizado na simulações. Para conferir a adequação de suas configurações ao problema de escoamento a altas velocidades num canal com obstáculos, foi realizado um teste com o problema canônico do escoamento supersônico sobre degrau; e a solução conferida com a de Woodward e Colella (1984).

Woodward e Colella (1984) simularam as equações de Euler do escoamento com número de Mach 3 sobre um degrau, enquanto que o Ansys CFX foi configurado com as equações de Navier-Stokes e modelo de turbulência $k - \epsilon$, nas mesmas condições das simulações de aceleração de chama.



Figura 3.1: Forward Facing Step, contornos do número de Mach. Density Plane XY [kg m^-3]



Figura 3.2: Forward Facing Step, contornos da densidade.

Uma diferença em relação às condições de contorno originais permite identificar a influência da viscosidade na solução. A aresta fronteiriça superior foi considerada como uma parede, ao invés da condição de simetria utilizada por Woodward e Colella (1984). Na parte superior esquerda das figuras 3.1 a 3.4, há uma pequena rampa que é o início de uma camada limite, cortada por uma linha vertical do choque normal que reduz o número de Mach supersônico para subsônico, conforme pode ser visto na figura 3.1. Consequentemente, a forquilha característica da reflexão de Mach foi deslocada para baixo, porém permanecendo aderente à solução de Woodward e Colella (1984).



Figura 3.3: Forward Facing Step, contornos da pressão.



Figura 3.4: Forward Facing Step, contornos da temperatura.

Observam-se nas figuras de 3.1 a 3.4, todas as características das reflexões de Mach estão presentes e nítidas nas localizações esperadas, indicando que o código computacional é capaz de capturar corretamente os detalhes relativos à reflexão e difração de ondas, da localização de choques e da rarefação. A máxima pressão de 11 bar na figura 3.3 e a máxima temperatura de 833 K na figura 3.4 também conferem com a solução canônica.

3.8 Modelagem numérica de um túnel de seção prismática com interposição de obstáculos

Foi simulado o experimento de Ciccarelli et al.(2010), de um túnel fechado em ambas extremidades, com comprimento total de 3,66 metros, seção quadrada de lado 7,6 cm, e 48 obstáculos regularmente espaçados entre si por uma altura da seção, esquematizado na figura 3.5. A razão de bloqueio de área dos obstáculos é 0,33, pois esta foi a configuração que havia apresentado as maiores velocidades de chama.



Figura 3.5: Esquemático do canal com obstáculos

A mistura inflamável é metano-ar estequiométrica, com fração mássica de metano $Y_{CH_4} = 0,05519$, a 47 kPa(abs) e 20 Celsius; razão de expansão ~ 7,6 e velocidade laminar de chama S_L de 0,47 m/s.

As simulações foram realizadas utilizando o software Ansys CFX versão 14, com resolução baseada na densidade, para os modelos de combustão: chama coerente (ECFM), velocidade de chama turbulenta com a correlação de Peters (BVM) e o modelo proposto nesta tese (BVM).

As paredes do túnel foram configuradas como paredes lisas adiabáticas sem escorregamento. Por requerimento do programa, as tampas nas extremidades que fecham o túnel foram configuradas como entrada e saída, porém de forma que os fluxos de massa em ambas fosse sempre nulo, deste modo, efetivamente implementando paredes fechadas no túnel. A geometria simulada foi 1/4 da geometria do canal, aplicando-se duas simetrias de espelhamento, uma vertical e uma horizontal, para reduzir o tempo de simulação (ver figura 3.6).

Para as simulações, 34 pontos de monitoramento espaçados a cada 10 cm foram configurados no eixo longitudinal de propagação da chama, bastante próximos ao encontro dos planos de simetria, para computar as velocidades de chama. Após as simulações, as séries temporais são processadas para determinar o tempo de chegada da chama a cada um dos pontos de monitoramento.

O campo inicial para todo o domínio de cálculo é inicializado com a variável de progresso c = 0 correspondendo à mistura não queimada. A ignição é efetuada por uma pequena esfera, localizada no encontro dos planos de simetria com uma tampa de extremidade do túnel prismático. Nesta esfera, é feito c = 1 configurando uma mistura queimada, sendo isto suficiente para iniciar o termo fonte no primeiro passo de tempo.

No caso do modelo de chama coerente, o campo também é configurado com a variável densidade de superfície de chama Σ igual a zero. Para a densidade de chama na esfera de ignição, o valor Σ inicial é um parâmetro não fixado pelo modelo de chama coerente, e iniciará uma discussão na seção de resultados.

As simulações efetuadas foram:

- Chama coerente (ECFM), densidade de superfície de chama 1, 0; 2, 0; 2, 5; 5, 0; 25; 50; 100; 200, em metros quadrados de superfície de chama por metro cúbico de volume, m^2/m^3 ;
- Velocidade de chama turbulenta (BVM), com a correlação de Peters;
- Modelo proposto, variação da turbulência, n = 4; 8; 16; 32; 64; 128;
- Modelo proposto, variação do pistonamento, $\alpha = 0, 14$; 0, 105; 0, 07; 0, 035; e flutuação turbulenta n = 16; 32; 64;

As equações de transporte e dos modelos de combustão de chama coerente e velocidade de chama são resolvidas com precisão de segunda ordem no espaço e

primeira ordem no tempo, com a utilização de limitadores de fluxo. A integração no tempo é explícita, com passos de tempo adaptativos da ordem de 1E - 5 a 1E - 7 segundos, limitados pela prescrição de número de Courant máximo 0,25.

Os passos de tempo são configurados para possuir de 12 a 16 iterações internas, que são o intervalo ótimo encontrado para o algoritmo adaptativo atender a erros relativos máximos limitados a 1E - 2 e erro relativo ponderado (RMS) menor que 1E - 4. Averiguou-se que um maior número de iterações não reduzia a ordem do erro de modo consistente, podendo até aumentá-lo.

A integração no tempo utilizando esquema de primeira ordem foi utilizada nas simulações, para evitar oscilações do número de Courant durante o instante inicial, quando o gradiente acentuado da variável de progresso ocasionou erros de ponto flutuante no modelo de chama coerente. Por uma questão de uniformidade, este esquema foi utilizado também para as demais simulações. Todavia, na finalização deste trabalho, as simulações mais representativas tiveram o esquema de integração no tempo configurado para 2^a ordem: Peters e modelo proposto com $\alpha = 0, 14$ e n = 16, que são mais estáveis na ignição que a chama coerente; e o número de pontos de monitoramento ao longo do canal foi aumentado para 239 posições na temperatura e 95 posições para pressão, coincidindo sempre as mesmas posições regulares em fase ou quadratura com a localização dos obstáculos.

3.9 Discretização e verificação numérica

O experimento de Ciccarelli et al.(2010) possuía 3,66 metros de túnel prismático, montados em seis módulos metálicos. A geometria foi discretizada em três níveis de refinamento diferentes:

- discretização menos refinada: x1, 256.032 elementos hexaédricos regulares, com aresta de 2,6 mm;
- discretização base: x2, 512.064 elementos hexaédricos, com aresta 1,3 mm na direção z (de propagação da chama); e 2,6 mm em x e y;
- discretização mais refinada: x8, 2.048.256 elementos hexaédricos regulares, com aresta de 1,3 mm.

O modelo de combustão testado e apresentado nas figuras desta seção, foi o modelo proposto na tese, com parâmetros $\alpha = 0,105$ e n = 32 para variação no refinamento da malha; e $\alpha = 0,14$ e n = 16 para variação da ordem de precisão da



Figura 3.6: Domínio computacional, malha estruturada com nível de discretização x2. Planos de simetria identificados nas cores violeta e bege.

integração no tempo.

A figura 3.7 apresenta curvas com o tempo necessário para a frente de chama alcançar uma determinada posição no canal com obstáculos. Cada curva é relacionada a um nível de discretização da malha, x1, x2 ou x8; e é obtida a partir de um pós-processamento, que identifica o exato passo de tempo no qual a temperatura supera 1250 K numa posição longitudinal no meio do canal. É possível notar que estas curvas são aproximadamente paralelas e suaves, e que os tempos de chegada da chama crescem monotonicamente com a posição dentro do canal. As curvas da figura 3.7 são utilizadas para gerar as curvas de aceleração de chama da figura 3.8, com velocidade de deslocamento da chama versus posição no canal. A velocidade de deslocamento da chama é obtida dividindo-se a distância percorrida pelo intervalo de tempo, a cada dois pontos de monitoramento sucessivos na malha computacional. Por este motivo, mesmo pequenas perturbações nas curvas da figura 3.7 são amplificadas para significativas oscilações de velocidades na figura 3.8.

Avaliar a convergência de malha num fenômeno transiente não é uma tarefa simples, pois os gradientes e descontinuidades características podem deslocar-se no domínio computacional; e os parâmetros transientes podem exibir comportamento bastante irregular entre dois níveis de discretização, decorrente de diferenças não-uniformes de fase, como resultado acumulado das diferenças da resolução espacial, mesmo em pontos de monitoramento regularmente espaçados.



Figura 3.7: Tempo de chegada da chama a pontos de monitoramento, para três níveis de discretização espacial.



Figura 3.8: Velocidade de deslocamento da chama, para três níveis de discretização espacial, calculada a partir de diferenças divididas.

A princípio, a figura 3.7 é uma boa candidata para aplicar a metodologia preconizada por Celik et al.(2008) e pelo *Journal of Fluid Mechanics*, baseada na identificação de ordem de precisão através da extrapolação de Richardson. Apesar de o refinamento de x1 para x2 ser efetuado na direção longitudinal do canal; e de x2 para x8 ser nas direções perpendiculares, Celik et al.(2008) fornecem uma fórmula de ponderação no volume, na qual independe a localização e orientação do refinamento, mas são contadas as divisões de incrementam a carga computacional investida na resolução do problema.

Pelo fato de não haver uma coordenada geométrica distintiva, uma opção é avaliar a diferença integral entre as três curvas x1, x2 e x8, seja na figura 3.8 como na 3.7. O problema é que realizando a análise de convergência segundo o procedimento descrito por Celik et al.(2008), ambas as figuras resultam numa ordem de precisão incoerente com a precisão espacial de 2^a ordem, declarada pelo código de simulação.

Na figura 3.8, é possível notar regiões nas quais a discretização menos refinada x1 fornece resultados mais aderentes a x8, do que o refinamento intermediário de x2. Estas inversões de sinais, aproximações e afastamentos irregulares são características dependentes de acúmulos de diferenças de fase, e amplificação de perturbações ao estimar a velocidade por diferenças divididas.

O fato inesperado é que mesmo utilizar a figura 3.7, aparentemente suave e comportada, no procedimento de Celik et al. (2008) também resulta numa ordem de precisão sem significado. Isto pode ser compreendido pela seguinte observação: as três curvas são monotonicamente crescentes e possuem aproximadamente a mesma forma assintótica, a diferença entre elas consistindo numa diferença de fase, que não é uniforme ao longo do eixo da abcissa; para minimizar erros decorrentes da diferença de fase, é possível deslocar uniformemente toda a curva x8 (quadrado vermelho) para cima, fazendo coincidir o ponto de início de x1, x2 e x8. Quando este deslocamento é realizado, a curva de x8 cruza a curva de x2 na figura 3.9; ou seja, como se a partir de um dado valor da abcissa próximo a 1.5 m, a malha menos refinada x1 fornecesse um resultado mais próximo da malha mais refinada, Comportamentos semelhantes com cruzamento de curvas também foram x8. encontrados para outros parâmetros de convergência, tais como perfis de máxima temperatura e máxima pressão ao longo do canal. Portanto, a diferença de fase irregular numa simulação transiente, e com uma região de transição subsônica para sônica ou supersônica, torna especialmente problemático verificar a ordem de



Figura 3.9: Tempo de chegada da chama a pontos de monitoramento, para três níveis de discretização espacial, com sincronização/alinhamento no primeiro ponto.

precisão espacial.

O que pode ser afirmado de modo seguro é que as curvas de x1, x2 e x8 da figura 3.7 apresentam certa consistência na forma, ao variar-se o refinamento espacial. Infelizmente, o conjunto de simulações realizadas limita a verificação a apenas esta constatação. Por outro lado, o código utilizado Ansys CFX foi configurado com precisão espacial de 2^a ordem e com um resolvedor do problema de Riemann, para capturar as descontinuidades nas simulações. Possivelmente rendendo uma verificação com maior propriedade, num problema físico com características mais bem definidas e comportamento dinâmico mais regular.

Originalmente, o número de malhas a ser considerado era maior, com as resoluções x16 e x32, ambas refinamentos de x8 na direção longitudinal do canal, tendo respectivamente 16 e 32 vezes mais elementos que o caso x1. Entretanto, considerada a ineficiência de paralelização inerente ao tempo de comunicação entre processadores em diferentes placas, e limitações de disco rígido, o tempo necessário para completar uma simulação transiente x16 é da ordem de um ano, inviabilizando realizar o número expressivo de simulações, necessário para caracterizar o modelo proposto, bem como realizar testes com variações nas condições de contorno e da ignição, com o modelo de chama coerente ou a correlação de Peters.



Figura 3.10: Tempo para elevação da pressão até 1 bar nos pontos de monitoramento, para $1^a e 2^a$ ordem de precisão na integração no tempo.

Para complementar a análise, foi realizada uma simulação com precisão de 2^a ordem no tempo, mantendo-se a discretização espacial da malha x2. Na figura 3.10 encontram-se as curvas de 1^a e 2^a ordem no tempo, do instante tempo a partir do qual a pressão de 1 bar passa a ser registrada num ponto de monitoramento. Corrigida uma diferença de fase para proporcionar melhor alinhamento, a forma das duas curvas é bastante aderente, ocorrendo um descolamento na posição 1,5 m, que é uma região do canal onde foi identificada uma transição abrupta das velocidades de deslocamento de chama. Porém, a forma das curvas permanece concordante após o descolamento, e não é esperado que uma variação na ordem temporal acarrete mudanças qualitativas nos comportamentos de aceleração de chama, resultados das simulações.

Capítulo 4

Resultados e Discussão

Para comparar o modelo proposto com os modelos clássicos, simulações com os modelos de chama coerente e de velocidade de chama com a correlação de Peters foram realizadas no software Ansys CFX. As simulações foram rodadas com 34 pontos de monitoramento de temperatura. No pós-processamento, os tempos de chegada de chama, correspondendo à variável de progresso de reação aproximadamente a 50% (T = 1250K), foram utilizados para computar as velocidades de chama nas posições de cada ponto de monitoramento por diferenças divididas. Considerado que a diferenciação numérica tende a amplificar ruídos, especialmente com os pequenos intervalos de tempo envolvidos; ocasionalmente obteve-se algumas velocidades negativas ou excessivamente altas, que foram cautelosamente retiradas da análise, tendo-se por critério a regularidade da série incluindo/excluindo o ponto de velocidade em questão. Após a análise principal das curvas, foram realizadas duas simulações adicionais, com 239 pontos de monitoramento de temperatura e 95 de pressão; para verificar as características da curva de aceleração de chama com a correlação de Peters e com o modelo proposto, para $\alpha = 0, 14$ e n = 16. Este maior número de pontos, 95 e 239, foi disposto na geometria para corresponder melhor ao espaçamento dos obstáculos, capturando sempre na mesma fase relativa aos obstáculos: a chegada da frente de chama, através da temperatura; e a pressão.

Para cada modelo de combustão, selecionou-se uma simulação mais representativa a ser apresentada em vários instantes de tempo, com os contornos das variáveis: pressão, densidade, temperatura, fração mássica de CH4, energia cinética turbulenta, número de Mach e magnitude da velocidade. Estas figuras mais elaboradas são designadas por lâminas, tendo o propósito de mostrar a evolução das frentes de chama desenvolvidas por cada modelo, nas mesmas escalas de cores. O instante de tempo identificado em cada captura é variável, pois o algoritmo de integração no tempo possui passo adaptativo, limitado pela prescrição de número de Courant máximo de 0, 25.

4.1 Modelo de chama coerente

Devido ao número apreciável de simulações efetuadas dentro do tempo computacional disponível, as resoluções de malha empregadas são consideravelmente menos refinadas quando comparadas às simulações de grandes escalas; e não era esperado que o modelo de chama coerente desempenhasse bem. O cálculo preciso da taxa de queima requer uma resolução muito fina do campo turbulento, e uma malha pouco refinada com o modelo $k - \epsilon$ tende a superestimar a taxa de cisalhamento nas paredes. O modelo $k - \omega$ chegou a ser testado, mas não permitiu efetuar a ignição.

A densidade inicial de superfície de chama Σ na esfera de ignição foi explorada como um grau de liberdade, para tentar obter a melhor aderência à curva de aceleração de chama experimental de Ciccarelli et al.(2010). Na referência de Driscoll (2008) valores experimentais para várias chamas foram compilados, com densidade de superfície Σ no intervalo $0, 12 - 0, 60 \ [mm^{-1}]$ ou $100 - 600 \ [m^2/m^3]$. Como as velocidades de chama obtidas com a chama coerente foram acima de 1300 m/s desde os instantes iniciais, o valor tentativo inicial de 400 m^2/m^3 foi reduzido gradualmente até que a ignição não fosse mais possível. O valor mais baixo encontrado que ainda era capaz de ignitar a mistura foi $2, 5 \ m^2/m^3$, mas continuou a resultar em velocidades de chama coerente com valores iniciais baixos de densidade de superfície de chama: $\Sigma = 2, 5 \ m^2/m^3, \Sigma = 5, 0 \ m^2/m^3$ apresentaram formação de onda de choque no início do túnel, imediatamente após a ignição, como na figura 4.1.

Devido a tensão de cisalhamento não ser calculada corretamente, o termo de produção de superfície de chama é amplificado nas paredes; fazendo com que a chama avance nelas em velocidade superior à porção da chama que segue atrasada pelo meio do canal, vista em perspectiva na figura 4.2 e em corte na 4.3. A chama nas paredes lança lóbulos laterais que engolfam o meio do túnel, desenhando uma concavidade. Os pontos de monitoramento são dispostos sobre a linha de simetria do túnel; tal que a concavidade anômala é capaz de fazer com que pontos de monitoramento mais avançados sejam acionados pelas bordas da chama na parede, antes da chama no espaço central entre obstáculos, resultando em velocidades negativas. As curvas de aceleração da chama coerente tiveram comportamento errático e velocidades fora da escala esperada. Não possuindo o significado adequado, não foram dispostas para comparação com os demais modelos. A utilização de uma função de parede de Poinsot et al.(1993); ou termo de destruição de superfície de Bruneaux et al.(1997) poderia amenizar a aderência da chama à parede, mas o problema fundamental permanece que o termo fonte governante é dependente de ϵ/k .



Figura 4.1: Isosuperfície de indicador de choque unitário do modelo de chama coerente com densidade inicial de superfície de chama $\Sigma = 2,5 \ m^2/m^3$. A superfície do choque é quase planar.



Figura 4.2: Isosuperfície de temperatura 1250 K do modelo de chama coerente com densidade inicial de superfície de chama $\Sigma = 2,5 \ m^2/m^3$. A superfície exibe reentrâncias, com os bordos laterais aderindo à parede do túnel.



Figura 4.3: Contornos de pressão da simulação usando o modelo de chama coerente de Boger et al.(1998). A superfície destacada possui temperatura igual a 1250K, ligeiramente superior a 50% de progresso da reação.

Na lâmina de pressão, figura 4.4, pode ser visto que há um gradiente bastante pronunciado desde os instantes iniciais, configurando uma onda de choque estável através da passagem de obstáculos. Na lâmina de densidade da mesma figura, são mostradas regiões de compressão de gás imediatamente atrás da onda de choque; nas quais podem ser notadas reentrâncias, que também ocorrem nas lâminas de temperatura e fração mássica de metano, figura 4.5. Estas reentrâncias são reflexo da chama aderida à parede e das concavidades vistas na figura 4.2. A extensão reduzida da região de meios-tons indica que a combustão completa-se rapidamente após a passagem da chama, com as imagens predominantemente tingidas pelos extremos em vermelho e azul.

Na lâmina da energia cinética turbulenta, figura 4.5, as regiões de alta turbulência correspondem a vórtices na esteira da chama. A frente chama sônica não perturba o escoamento a montante, e seu rastro a jusante ocorre na forma de vórtices nas bordas dos obstáculos. A distâncias maiores da frente de chama, os vórtices coalescem em regiões permeadas pela energia cinética turbulenta. Nas lâminas do número de Mach e da magnitude da velocidade, figura 4.6, pode ser confirmada a extensão da região sônica, acoplada ao choque da lâmina de pressão. Na extensão já percorrida pela chama, podem ser vistos padrões de interferência resultantes da difração de ondas através dos obstáculos. Pertinente notar que as regiões de maior velocidade estão acopladas à parte traseira da frente de chama, a uma distância de alguns obstáculos da coalescência da esteira dos vórtices turbulentos.



Figura 4.4: Contornos de pressão e densidade; modelo de chama coerente (ECFM), com densidade inicial de superfície de chama $\Sigma = 2,5 \ m^2/m^3$.



Figura 4.5: Contornos de temperatura, fração mássica de metano e energia cinética turbulenta; modelo de chama coerente (ECFM), com densidade inicial de superfície de chama $\Sigma = 2,5 \ m^2/m^3$.



60g

Figura 4.6: Contornos de número de Mach e magnitude da velocidade; modelo de chama coerente (ECFM), com densidade inicial de superfície de chama $\Sigma = 2,5 m^2/m^3$.

4.2 Modelo de velocidade de chama com a correlação de Peters

Os resultados do modelo de velocidade de chama turbulenta com a correlação de Peters foram melhores, inclusive o formato da superfície de chama na figura 4.7. Na figura 4.8 a curva com 33 pontos corresponde a uma forma filtrada e assintótica (aproximada) da curva com 219 pontos. O comportamento de ambas reflete um aumento de velocidade linear com a distância percorrida, muito superior ao da curva experimental; e uma oscilação de velocidade montada sobre a rampa de aceleração. Na posição 1 m, a velocidade de deslocamento da chama é bastante próxima de 1000 m/s, quando as curvas resultantes da correlação de Peters se estabilizam num patamar superior. A curva com 219 pontos tem a forma serrilhada, bastante regular nas oscilações de velocidade, pois as velocidades plotadas são capturadas na mesma fase e mesma posição relativa entre a frente de chama e o obstáculo da câmara em questão. Na posição 2,4 m, as curvas obtidas de simulação numérica e experimental de Ciccarelli et al.(2010) finalmente aderem.



Figura 4.7: Isosuperfície de temperatura 1250 K do modelo de velocidade de chama turbulenta com correlação de Peters. As reentrâncias curvas indicam vorticidade na passagem pelos obstáculos. Porções vazadas da superfície indicam tangência à parede.

A figura 4.9 mostra o perfil de chama da simulação com a correlação de Peters. A razão de aspecto da chama parece confirmar a encontrada na figura 2.5 dos experimentos de Johansen e Ciccarelli (2009), e Ciccarelli et al.(2010), porém o campo de escoamento é permeado desde os instantes iniciais por níveis de pressão elevados, o que condiz com as velocidades de chama superestimadas na rampa da figura 4.8.



Figura 4.8: Curvas de aceleração de chama: correlação de Peters (1999) e experimento de Ciccarelli et al.(2010).

Nas lâminas de pressão e densidade, figura 4.10, a pressão estática supera 1,5 barg um pouco antes do quinto obstáculo; nos contornos da densidade, pode ser visto que esta elevação de pressão decorre da compressão do gás contra o quinto obstáculo. A partir deste instante, esta pressão mais elevada destacada em vermelho, começa a se propagar em ambos os sentidos no canal. A densidade nos gases não-queimados apresenta elevação imediatamente antes da passagem da chama, e uma rarefação após. Nas lâminas de temperatura e fração mássica de metano, figura 4.11, a forma arredondada da frente de chama é evidenciada, com o respectivo consumo de combustível e elevação de temperatura. Em alguns instantes capturados, também é possível identificar a formação de vórtices simétricos nas bordas dos obstáculos. Nesta mesma figura também é possível conferir, que um pouco antes da chama alcançar o quinto obstáculo, regiões de elevada energia cinética aumentam de tamanho e iniciam coalescência. Nas lâminas do número de Mach e da magnitude da velocidade, ocorre um crescimento da região de alta velocidade, que se segmenta a cada passagem da chama através dos obstáculos. O segmento destacado da chama e deixado para trás é rapidamente amortecido a níveis mais baixos de velocidade.

Na lâmina com número de Mach, figura 4.12, o regime sônico é estabelecido



Figura 4.9: Contornos de pressão da simulação usando o modelo de velocidade de chama turbulenta com a correlação de Peters (1999). A superfície destacada possui temperatura igual a 1250K, ligeiramente superior a 50% de progresso da reação.

bastante cedo, imediatamente após a passagem da frente de chama pelo quarto obstáculo. O reflexo aparece na lâmina de pressão e densidade, figura 4.10. Entre o início da queima e a combustão concluída, nota-se uma aproximação e afastamento destas demarcações (bordas vermelho e azul), que é ritmada com a passagem através dos obstáculos, nas lâminas de temperatura e fração mássica, na figura 4.11.



Figura 4.10: Contornos de pressão e densidade; modelo de velocidade de chama turbulenta com correlação de Peters.





Energia Cinética Turbulenta

[m^2 s^-2]

. 003

Figura 4.11: Contornos de temperatura, fração mássica de metano e energia cinética turbulenta; modelo de velocidade de chama turbulenta com correlação de Peters.



7.00°×002

Figura 4.12: Contornos de número de Mach e magnitude da velocidade; modelo de velocidade de chama turbulenta com correlação de Peters.

4.3 Modelo proposto

Na figura 4.13, o parâmetro n controla a proporcionalidade entre a velocidade de chama turbulenta e a componente turbulenta da velocidade v', estimada através da energia cinética turbulenta. O comportamento das curvas é regular, no sentido de que a diminuição de n irá aumentar as velocidades de deslocamento de chama desenvolvidas nas curvas de aceleração. Entretanto, para n = 4, ocorre uma grande oscilação no intervalo 1,5 a 2,5 m; após, esta curva estabiliza-se com o mesmo comportamento assintótico das demais curvas, sugerindo que o estabelecimento de velocidades mais altas não é ditado pelo parâmetro n.

A concordância dos picos e valores para diferentes valores de n é indicativo de certa concordância de fase entre as simulações, e portanto da regularidade das curvas de aceleração de chama. A figura 4.13 permite observar dois pontos principais: a existência de uma banda de oscilação de velocidade, entre 600 e 900 m/s, de um comportamento estável e recorrente no escoamento, o qual não permite à chama acelerar mais; e o início da oscilação de velocidade no patamar intermediário, sugerindo que seja uma zona de transição de velocidades baixas para altas.



Figura 4.13: Curvas de aceleração de chama: influência da variação do parâmetro n e pistonamento fixo $\alpha = 0$; e experimento de Ciccarelli et al.(2010).

Na figura 4.14, é possível verificar a razão de aspecto do preenchimento dos compartimentos do canal, pelas abas laterais das chamas. Este preenchimento é tanto maior, quanto maior o nível de turbulência, associado ao menor valor do parâmetro n. Na figura 4.15, a frente de chama do modelo proposto exibe o mesmo aspecto e proporções da correlação de Peters, figura 4.7 e experimental de Johansen e Ciccarelli (2009), figura 2.5.



Figura 4.14: Contornos de pressão e comparação das razões de aspecto das frentes de chama: influência da variação do parâmetro n (pistonamento $\alpha = 0$). A superfície destacada possui temperatura igual a 1250K, ligeiramente superior a 50% de progresso da reação. Ignição ocorrida na parede fechada à direita da figura.

A aplicação do parâmetro $\alpha = 0,035$, na figura 4.16, faz com que as curvas de aceleração de chama com n = 16, 32 e 64 se aproximem da curva experimental na rampa, diferindo por não mais que 100 m/s neste intervalo, as oscilações características aparecem após a transição entre 1,7 e 2,2 m, com o valor máximo de velocidade de 800 m/s, bastante próximo à curva experimental.



Figura 4.15: Isosuperfície de temperatura 1250 K do modelo proposto de velocidade de chama turbulenta, com $\alpha = 0, 14$ e n = 16. As reentrâncias curvas indicam vorticidade na passagem pelos obstáculos. Porções vazadas da superfície indicam tangência à parede.



Figura 4.16: Curvas de aceleração de chama: influência da variação do parâmetro n e pistonamento fixo $\alpha = 0,035$; e experimento de Ciccarelli et al.(2010).

Na figura 4.17 para $\alpha = 0,07$, as curvas de aceleração se elevam por sobre a curva experimental na rampa, do início do canal até 1,7m, mas se aproximando bastante da curva experimental deste ponto em diante.



Figura 4.17: Curvas de aceleração de chama: influência da variação do parâmetro n e pistonamento fixo $\alpha = 0,07$; e experimento de Ciccarelli et al.(2010).

Na figura 4.18 para $\alpha = 0, 105$, as curvas de aceleração possuem diferença acentuada sobre a curva experimental na rampa. A curva n = 16 exibe uma grande oscilação de velocidade em torno de 1,7 m, e separa-se das curvas com n = 32 e 64. A curva n = 16, estabelece um patamar superior, mais estável e pouca oscilação de velocidade, destacando o efeito do parâmetro α . Os comportamentos das curvas de aceleração mostradas, com aparentes platôs e oscilações, apresentam semelhança com os padrões das curvas nos experimentos de Kuznetsov et al.(2002), na figura 2.9.

Na figura 4.19, com $\alpha = 0, 14$, os valores de n = 16, 32 e 64 originam curvas de aceleração acima da curva experimental, com um distinto patamar acima desta. Nesta figura fica claro que o parâmetro α determina a transição entre a região de velocidades 800 a 900 m/s para acima de 1000 m/s Para n = 32 e 64, há uma grande oscilação de velocidade, não notada para n = 16. Na realidade, existe uma oscilação de mesma amplitude para n = 16, mas que não foi capturada pelos 33 pontos de monitoramento.

Na figura seguinte 4.20, na mesma simulação com $\alpha = 0, 14$ e n = 16, com 229 pontos de monitoramento de temperatura, é possível perceber que o pico esperado realmente ocorre, e também uma série de pequenas oscilações de maior frequência, montada sobre a série com menos pontos de monitoramento. As oscilações de velocidade intensificam-se a partir de 0,7 até 1,5 m, quando esta simulação estabelece seu patamar de velocidade superior. O relativo bom alinhamento e concordância
das séries, com 33 e 229 pontos, apenas reitera a confiança no comportamento assintótico das curvas com menos pontos de monitoramento, das figuras 4.13, 4.16, 4.17, 4.18 e 4.19.



Figura 4.18: Curvas de aceleração de chama: influência da variação do parâmetro n e pistonamento fixo $\alpha = 0, 105$; e experimento de Ciccarelli et al.(2010).



Figura 4.19: Curvas de aceleração de chama: influência da variação do parâmetro n e pistonamento fixo $\alpha = 0, 14$; e experimento de Ciccarelli et al.(2010).



Figura 4.20: Curvas de aceleração de chama, para $\alpha = 0, 14$ e n = 16, para dois conjuntos de pontos de monitoramento; e experimento de Ciccarelli et al.(2010).

As duas configurações de parâmetros que mais se aproximaram das curvas de velocidade experimentais de Ciccarelli et al.(2010) foram $\alpha = 0, 14$ e n = 16; e $\alpha = 0, 105$ e n = 32, na forma aproximada de um envelope superior e outro inferior para as velocidades computadas a partir das imagens Schlieren na figura 2.6.

Na figura 4.21 o modelo proposto é simulado com parâmetros $\alpha = 0, 14$ e n = 16; conforme o tempo avança, é possível ver as mudanças no formato da chama através da passagem de obstáculos, da direita para a esquerda, com a compressão dos gases não-queimados à frente da chama; ao fundo, o nível de pressão aumenta gradualmente; na esteira deixada para trás, podem ser vistos pares de vórtices se formando e desprendendo das bordas dos obstáculos.

Na figura 4.22, são acrescidas três camadas cisalhantes ao conteúdo da figura 4.21; na qual é possível notar o gás não-queimado sendo empurrado para a esquerda, ocasionando o cisalhamento de foliações e o aparecimento de pequenos vórtices a montante da chama e junto aos obstáculos; a jusante da chama, a separação de escoamento é intensa, e as camadas cisalhantes desprendem-se em vórtices bem definidos.



Figura 4.21: Contornos de pressão da simulação usando o modelo proposto, pistonamento $\alpha = 0, 14$ e turbulência n = 16. A superfície destacada possui temperatura igual a 1250K, ligeiramente superior a 50% de progresso da reação.



Tempo = 0.00958289 [s]

Figura 4.22: Contornos de pressão da simulação usando o modelo proposto, pistonamento $\alpha = 0, 14$ e turbulência n = 16. Três superfícies de vorticidade constante $\zeta_x = 700, 2100$ e 6300 s^{-1} , foram adicionadas à figura 4.21 para mostrar cisalhamento e estruturas vorticais no escoamento.

Na figura 4.23, as posições de três dos 95 pontos de monitoramento de pressão coincidiram com os pontos do experimento de Ciccarelli et al.(2010)., com os mesmos 3,66 m de canal. Desta forma, as curvas para P1, P3 e P4 foram aproximadamente digitalizadas a partir da figura original 4.24.



Figura 4.23: Curvas de pressão no tempo, para três pontos de medição no experimento de experimento de Ciccarelli et al.(2010). Linhas contínuas foram levantadas da simulação do modelo com $\alpha = 0, 14$ e n = 16; linhas com marcadores são digitalizadas das curvas obtidas experimentalmente.



Figura 4.24: Curvas de pressão no tempo, para quatro sensores localizados ao final do túnel, reproduzido de Ciccarelli et al.(2010).

No pós-processamento, as fases das curvas experimentais e simuladas foram alinhadas, para verificar a aderência. Na figura 4.23, as séries de pressões obtidas no experimento são linhas com marcadores, enquanto que as da simulação $\alpha = 0, 14$ e n = 16 são linhas lisas. O eixo à esquerda é graduado em *barg*, e para a correta leitura da elevação de pressão, deve-se subtrair o valor basal da pressão de cada ponto de monitoramento, por exemplo: para as curvas de P3, os valores reais da pressão no tempo são os valores lidos no eixo à esquerda, subtraídos de 22 barg.

Na figura 4.23, as curvas simuladas são mais suaves e acompanham de forma aproximada as duas maiores elevações de pressão em cada série experimental, mas errando as diferenças de fase para as elevações subsequentes. Os picos mais elevados de pressão das séries temporais experimentais de 20 barg não foram de fato capturados. Entretanto, a localização espacial destes picos e suas amplitudes podem ter acurácia melhorada se uma malha mais refinada for utilizada, o que permitiria resolver gradientes mais acentuados e também uma localização mais exata das descontinuidades de pressão; como choques, reflexões de ondas e suas interferências construtivas.



Figura 4.25: Contornos de pressão e densidade; modelo proposto de velocidade de chama turbulenta, com $\alpha = 0, 14$ e n = 16.



n = 16.

[m^2 s^-2] 7.75° ×003 2.500×003 3.75ex003 5.00° ×003 Time Value = 0.00242985 [s]

Time Value = 0.00596581 [s] Time Value = 0.00661185 [s] Time Value = 0.00706648 [s] Time Value = 0.00741021 [s] Time Value = 0.00767164 [s] Time Value = 0.00788559 [s] Time Value = 0.00808008 [s] Time Value = 0.008242 [s] Time Value = 0.0083878 [s] Time Value = 0.00851939 [s] Time Value = 0.00863766 [s]

Time Value = 0.0087506 [s] Time Value = 0.00885234 [s] Time Value = 0.00895241 [s] Time Value = 0.00904374 [s]

Time Value = 0.00913456 [s] Time Value = 0.00922009 [s] Time Value = 0.00930035 [s]

Time Value = 0.00937943 [s]

Energia Cinética Turbulenta

Time Value = 0.00479968 [s]

Time Value = 0.00945111 [s]

Time Value = 0.00951802 [s]

Time Value = 0.00958289 [s]

Time Value = 0.00963942 [s]

Figura 4.26: Contornos de temperatura, fração mássica de metano e energia cinética turbulenta; modelo proposto de velocidade de chama turbulenta, com $\alpha = 0, 14$ e

97



 o_{0_2}

Figura 4.27: Contornos de número de Mach e magnitude da velocidade; modelo proposto de velocidade de chama turbulenta, com $\alpha = 0, 14$ e n = 16.

Nas lâminas de pressão e densidade, figura 4.25, a pressão eleva-se acima de 1,5 barg antes do nono obstáculo; nos instantes seguintes, esta pressão elevada pode ser vista se propagando para os dois sentidos dentro do canal; na região de densidade rarefeita, é possível identificar desprendimento de vórtices nas bordas de obstáculos.

Nas lâminas de temperatura, fração mássica de CH4, figura 4.26, o avanço da chama segue contornos bastante semelhantes ao da lâmina correspondente com a correlação de Peters, figura 4.11; mas a distância entre o início da queima e a combustão completa é nitidamente maior, identificada pela maior presença de meios-tons nos campos de temperatura e fração mássica de CH4. Na lâmina de energia cinética turbulenta, figura 4.26, percebe-se que os níveis de turbulência são mais concentrados perto das paredes e muito menos intensos que os resultantes da correlação de Peters, na figura 4.11; este padrão também é diferente do modelo de chama coerente na figura 4.5, na qual a energia cinética turbulenta concentra-se em vórtices bastante intensos.

Nas lâminas do número de Mach e magnitude da velocidade, figura 4.27, as regiões de alta velocidade encontram-se atrás da chama; crescendo, segmentando-se na passagem de obstáculos, e sofrendo amortecimento, como na lâmina correspondente da correlação de Peters, figura 4.12, porém com gradientes mais suaves de velocidade. O estabelecimento do regime sônico pode ser identificado entre o oitavo e o nono obstáculo, com o número de Mach unitário.

4.4 Comparação dos modelos simulados

Na figura 4.28 estão dispostos contornos de fração mássica de metano e da energia cinética turbulenta, dos modelos de chama coerente, velocidade de chama com a correlação de Peters e do modelo proposto. Estas duas variáveis são particularmente convenientes para diferenciar os comportamentos dos três modelos. A fração mássica delimita o progresso da chama, enquanto que a energia cinética turbulenta fornece um retrato do campo turbulento.

Nesta figura 4.28, o modelo de chama coerente produziu um choque acompanhado de uma frente de chama anômala aderida à parede, e uma fileira de pares de vórtices na figura (4.28, topo). A correlação de Peters produziu uma frente de chama de aspecto compatível com o experimento de Johansen e Ciccarelli (2009, 2010), porém acompanhada de uma esteira turbulenta bastante intensa a montante e a jusante da chama (4.28, ao meio). O modelo proposto também produziu uma frente de chama com a forma esperada, porém com baixa intensidade de turbulência no campo de escoamento; concentrando-se a energia cinética turbulenta no cisalhamento dos gases com a parede (4.28, abaixo).

Apesar de o modelo de chama coerente não ter o resultado fisicamente correto com relação à aderência da chama à parede, o choque formado e o escoamento após a passagem da chama aparentam ser um comportamento plausível para o regime detonado. De fato, quando a frente de chama se propaga por compressão mecânica e não através da difusão de calor e espécies, não é esperado que a turbulência, em especial das grandes escalas, tenha papel preponderante na detonação.

Pela associação dos resultados relacionados, a esteira turbulenta gerada pela correlação de Peters é a responsável pelo excesso de velocidade na rampa da curva de aceleração de chama, na figura 4.8. A presença desta esteira atua como um mecanismo forçado sobre a chama, que não experimenta uma transição irregular de velocidades abaixo de 600 m/s para acima de 900 m/s, conforme observado na figura do experimento 4.29 (repetida da fig.2.6), mas apenas uma saturação neste limite superior, logo na posição 1 m. Portanto, apesar da correlação de Peters reproduzir o patamar superior de velocidade, o mecanismo de aceleração na rampa não aparenta ser o verdadeiro.

O modelo proposto, com parâmetros $\alpha = 0, 14$ e n = 16 na figura 4.20, também excedeu a curva experimental assintótica na rampa e no patamar superior. Entretanto, se consideradas as grandes oscilações de velocidade na figura 4.29, inferidas



Figura 4.28: Contornos de fração mássica e energia cinética turbulenta, para: (topo) o modelo de chama coerente de Boger et al.(1998), com $\Sigma = 2,5 m^2/m^3$; (ao meio) a correlação de Peters (1999); (abaixo) o modelo proposto, com $\alpha = 0, 14$ e n = 16. Linhas azuis indicam a mesma posição da frente de chama nas imagens.



Figura 4.29: Velocidades de deslocamento de chama versus distância percorrida, com razão de bloqueio de área (BR) 0,33, Ciccarelli et al.(2010). A curva verde mostra as oscilações da velocidade, inferida através de fotografia de alta velocidade.

através de fotografia Schlieren de alta velocidade, a simulação com o modelo proposto aproxima-se do limite superior de velocidades computadas a partir do experimento. Além disto, pelas observações anteriores sobre a chama coerente; a obtenção de altas velocidades de deslocamento de chama sem necessitar de uma esteira turbulenta intensa, na figura 4.28, é um indicativo de que talvez seja possível utilizar o modelo proposto para simular a aceleração de chama até quase o regime detonado.

Na figura 4.30 são exibidas três curvas, contendo as máximas pressões atingidas ao longo do canal, para três simulações: com a correlação de Peters, e para o modelo proposto com $\alpha = 0, 14$ e n = 16; e $\alpha = 0, 105$ e n = 32. A curva de Peters eleva-se acentuadamente a partir de 0,6 m e apresenta oscilações bastante regulares, enquanto as outras duas demoram a estabelecer elevações, com $\alpha = 0, 14$ e n = 16alcançando patamar mais elevado que $\alpha = 0, 105$ e n = 32. Este comportamento das pressões máximas confere bem as respectivas curvas de velocidade nas figuras 4.8 de Peters, 4.20 de $\alpha = 0, 14$ e n = 16; e 4.18 de $\alpha = 0, 105$ e n = 32.

A regularidade das oscilações, da curva de pressão máxima com a correlação de Peters, é mais uma característica que pode ser associada à distribuição densa de energia cinética densa na esteira turbulenta atrás da chama, que se mantém



Figura 4.30: Pressões máximas registradas nos pontos de monitoramento, para três modelos de velocidade de chama: correlação de Peters (1999); $\alpha = 0, 14$ e n = 16; e $\alpha = 0, 105$ e n = 32.

bastante uniforme ao longo do canal, conforme pode ser visto na lâmina 4.11.

Sendo as simulações transientes, efetuou-se a gravação de todo o campo de escoamento a cada 100 passos de tempo. Os arquivos foram utilizados para compor os instantes iniciais mostrados nas lâminas apresentadas; mas também permitiram levantar informações globais do campo completo do escoamento, como valores extremos de pressão, velocidade e número de Mach, dispostos na tabela 4.1. Os valores encontrados são bastante distintos das séries de dados levantadas apenas com os pontos de monitoramento, pois reportam a existência em algum lugar do canal obstruído, de pressões e velocidades muito elevadas.

Na simulação de chama coerente (ECFM), o valor de 47,5 barg é compatível com a propagação da onda de choque observada na figura 4.1. Para a correlação de Peters, o valor de 18 barg na tabela pode parecer inesperadamente baixo, considerando-se a figura 4.30, com histórico de pressões mais elevado que as simulações do modelo proposto. Todavia, se considerada a constância da esteira turbulenta associada à correlação de Peters; este valor de 18 barg é mais um indicativo de que a energia cinética turbulenta, concentrada atrás da frente de chama, atua como um termo forçante e possivelmente também um atenuador para outros mecanismos de elevação de pressão; por exemplo, uniformizando as fases de ondas de pressão ao longo do canal, e assim impedindo interferências construtivas.

	Pressão	Velocidade	Mach
	[barg]	[m/s]	_
$\alpha = 0, 140, \ n = 16$	49	-874 a 1240	1.86
$\alpha = 0.105$ $n = 32$	38	702 + 1973	1.87
$\alpha = 0, 100, \ n = 32$	30	-192 a 1213	1.07
Peters	18	-700 a 1320	1.88
ECFM $\Sigma = 2.5$	47,5	-960 a 1310	1.87

Tabela 4.1: Valores extremos de pressão, velocidade e número de Mach, para simulações selecionadas

Nas simulações com o modelo proposto, com $\alpha = 0, 14$ e n = 16, e $\alpha = 0, 105$ e n = 32, os elevados valores de pressão podem ser resultado de alguma interferência construtiva próxima aos cantos entre as paredes. A diferença do valor de 49 barg na tabela 4.1, para a relativa suavidade de curvas de pressão na figura 4.23, de $\alpha = 0, 14$ e n = 16; pode ser explicada pelo fato de os pontos de monitoramento se encontrarem na altura da linha de simetria do canal, longe dos encontros entre paredes perpendiculares.

Na tabela 4.1, os valores dos números de Mach e das máximas velocidades são bastante próximos entre si, o que confere alguma credibilidade às pressões máximas reportadas. Entretanto, devido ao seu limitado detalhe, a tabela serve mais como um ponto de atenção e verificação das simulações. Para uma conferência mais precisa, requer-se uma análise mais ampla dos arquivos dos passos de tempo gravados, para localizar os pontos e instantes de tempo que originaram estes valores extremos.

Capítulo 5

Conclusões e Sugestões

5.1 Conclusões

Tendo em vista a aparente aplicabilidade do modelo de velocidade de chama turbulenta, e na tentativa de considerar a expansão dos gases queimados, o presente trabalho postulou um termo adicional, cuja forma foi obtida a partir de equações fundamentais. Este termo foi modelado através de uma parametrização simples para a velocidade de chama, e o modelo resultante proposto foi simulado num experimento de referência, tendo sido identificados os efeitos da variação de seus parâmetros: α , para pistonamento por expansão de gases queimados; e n para turbulência.

Foram apresentados resultados das simulações com os modelos de chama coerente, velocidade de chama turbulenta com a correlação de Peters, e com o modelo proposto. No modelo de chama coerente, ajustar a densidade inicial de superfície de chama para valores bastante baixos não impediu a formação de uma onda de choque fictícia, logo no início da simulação. Valores iniciais altos desta densidade de superfície apenas adiantaram a ocorrência deste choque, trazendo ainda problemas de estabilidade numérica relacionados ao número de Courant.

A simulação com a correlação de Peters apresentou um formato de chama mais próximo do real, aderindo ao patamar superior de velocidade do experimento; porém com velocidades iniciais muito acima durante a fase de aceleração linear com a distância percorrida. Este comportamento de altas velocidades iniciais parece ter relação com uma intensa esteira turbulenta acoplada à frente de chama, estendendo-se a montante a jusante desta.

O modelo proposto foi simulado para variações em seus dois parâmetros, α e

n, de forma a discriminar os efeitos de cada um. As variações de α e n foram relacionadas a seus efeitos nas curvas de aceleração, e à razão de aspecto das chamas simuladas. As duas configurações de parâmetros que mais se aproximaram das curvas de velocidade experimentais de Ciccarelli et al.(2010) foram $\alpha = 0, 14$ e n = 16; e $\alpha = 0, 105$ e n = 32, na forma aproximada de um envelope superior e outro inferior para as velocidades computadas a partir das imagens Schlieren.

A curva de aceleração do modelo proposto, com $\alpha = 0, 14$ e n = 16, aproximouse dos valores mais altos das oscilações de velocidade, computadas através das imagens Schlieren; e as curvas de elevação da pressão no tempo, ajustadas as suas fases, tiveram aderência com as séries temporais de três sensores no experimento de Ciccarelli et al.(2010). Apesar de não terem sido capturados os picos com os valores máximos registrados nos sensores, é razoável esperar que esta característica possa ser melhorada através do refinamento de malha, com maior acurácia na localização de gradientes de pressão.

A correlação de Peters resultou em pressões máximas mais elevadas e regulares que o modelo proposto nas séries temporais dos pontos de monitoramento da simulação (~ 14 barg), mas não apontou valores extremos muito maiores no restante do campo de escoamento. Em contraste, o modelo proposto detectou valores extremos elevados: para $\alpha = 0, 14$ e n = 16 (49 barg); e para $\alpha = 0, 105$ e n = 32 (38 barg), substancialmente maiores que a obtida com a correlação de Peters (18 barg). Assumindo-se que o código é consistente, e que as simulações foram executadas de forma adequada, estas indicações sugerem que a esteira turbulenta associada à correlação de Peters esteja de alguma forma amortecendo as ondas de pressão, evitando suas reflexões e interferências construtivas; que são a forma mais provável de se obter pressões próximas a 50 barg.

Na presente tese, o termo adicional postulado foi relacionado à expansão dos gases queimados, e foram mostradas as caracterísicas do campo de escoamento decorrentes de sua utilização. Este é um passo significante para reverter a hipótese de incompressibilidade nos modelos clássicos da combustão pré-misturada, e alcançar maior acurácia da simulação em problemas de aceleração de chama.

5.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

A simulação com o modelo de velocidade de chama turbulenta é um modelo propagativo simples e robusto, que não possui exacerbada dependência com o refinamento de malha próximo às paredes, constituindo um candidato razoável para simulações de deflagrações e detonações de hidrogênio em grandes escalas geométricas, objetos dos cenários acidentais estudados na análise de segurança de centrais nucleares. Nesta linha, o desenvolvimento do modelo proposto, pode ser continuado de diferentes formas.

Por exemplo, simulando-se o mesmo experimento de Johansen e Ciccarelli (2009, 2010), porém com razões de bloqueio de área BR 0,50 e 0,67, para verificar se existe uma tendência diferente das curvas experimentais, que não possa ser acomodada dentro da parametrização com $\alpha \in n$.

Uma vez que a equação protótipo é uma forma propagativa simples de advecção não-homogênea, a influência do mecanismo químico é limitada à razão de expansão; e esta deve ser explorada simulando-se os experimentos de Kuznetsov et al.(2002), também em geometria do tipo túnel obstruído por obstáculos. Agora porém, com o interesse em estender o novo modelo para diferentes proporções de combustível e oxidante.

Se estiver dominado o problema de diferentes estequiometrias, pode-se então proceder à implementação do modelo proposto com a fração de mistura, para construir um modelo de combustão parcialmente misturada, e tratar de problemas como o experimento mc043 de Kotchourko (2005), também em túnel obstruído, mas com duas composições inflamáveis separadas por uma membrana de interface. Apesar de não haver realmente uma grande mistura entre as duas composições, devido à rápida passagem da chama, é importante ser capaz de tratar um problema que apresentou uma grande dispersão de resultados entre diferentes códigos de simulação.

Outro estudo possível seria estender o modelo proposto para geometria menos confinadas, como por exemplo a explosão de um hemisfério de gás inflamável, conforme o artigo de Molkov et al.(2007). Eventualmente encontrando valores de coeficientes α e n válidos para túneis obstruídos e também geometrias mais abertas, ou funções de ajuste destes coeficientes, visando aderência/estimativas conservadoras para aplicação em cenários acidentais de larga escala. Da forma como o termo adicional foi deduzido para a combustão pré-misturada, este também seria aplicável como termo adicional nas equações dos modelos de taxa de mistura (Eddy Break Up, Bray-Moss-Libby e chama coerente). A depender da forma de fechamento para a equação de transporte da densidade de superfície de chama, o modelo de Boger (1998) pode já estar tratando o pistonamento de forma indireta, através da advecção da superfície de chama. Entretanto, seria interessante testar a influência do termo adicional nestes modelos, em malhas refinadas para resolução das grandes escalas turbulentas, até altas velocidades de chama, ainda não cobertas pela simulação de Johansen e Ciccarelli (2013). Também, na disponibilidade computacional para simular com um grande refinamento de malha, é possível que o termo adicional não necessite ser modelado por uma forma advectiva; e por conseguinte não mais necessite de coeficientes de ajuste $\alpha e n$.

Em particular, se este último ponto for respondido de modo satisfatório, pode-se considerar que a restrição imposta pela hipótese de incompressibilidade foi vencida para a combustão pré-misturada, e outras aplicações industriais de maior complexidade possam ser exploradas, como a acústica de equipamentos acionados por combustão, cujos modos de excitação podem diferir significantemente, quando calculados com e sem a hipótese de incompressibilidade.

Referências Bibliográficas

- ABDEL-GAYED, R., BRADLEY, D., HAMID, M., et al., 1984, "Lewis number effects on turbulent burning velocity". In: 20th Symposium (International) on Combustion, pp. p. 505–12. The Combustion Institute, Pittsburgh.
- [2] ABOU-RJEILY, Y., CÉNÉRINO, G., DROZD, A., et al., 2011, Mitigation of Hydrogen Hazards in Severe Accidents in Nuclear Power Plants. Relatório técnico, International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria.
- [3] BAKER, L., JUST, L., 1962, Studies of metal-water reactions at high temperatures: Experimental and theoretical studies of the zirconium-water reaction. Relatório técnico, Argonne National Laboratory.
- [4] BARALDI, D., HEITSCH, M., WILKENING, H., 2007, "CFD simulations of hydrogen combustion in a simplified EPR containment with CFX and REACFLOW", Nuclear Engineering and Design, v. 237, n. 15-17 (set.), pp. 1668–1678.
- [5] BATCHELOR, G., 1967, An Introduction to Fluid Dynamics. Cambridge Mathematical Library.
- [6] BAUMANN, W., BREITUNG, W., KAUP, B., et al., 2001, ITER-FEAT Accident Analysis on Hydrogen Detonation Using DET3D and GASFLOW. Relatório técnico, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe, Germany.
- [7] BELL, J., DAY, M., SHEPHERD, I., et al., 2005, "Numerical simulation of a laboratory-scale turbulent V-flame", Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, v. 102, n. 29, pp. 10006–10011.
- [8] BELL, J. B., DAY, M. S., GRCAR, J. F., 2002, "Numerical simulation of premixed turbulent methane combustion", *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 29, n. 2, pp. 1987 – 1993.
- [9] BOGER, M., VEYNANTE, D., BOUGHANEM, H., et al., 1998, "Direct numerical simulation analysis of flame surface density concept for large eddy si-

mulation of turbulent premixed combustion", *Symposium (International)* on Combustion, v. 27, n. 1, pp. 917 – 925. Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion Volume One.

- [10] BRADLEY, D., LAU, A. K. C., LAWES, M., 1992, "Flame Stretch Rate as a Determinant of Turbulent Burning Velocity", *Philosophical Transactions* of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, v. 338, n. 1650, pp. 359–387.
- [11] BRAUN, M., 2011. "The Fukushima Daiichi Incident". Disponível em: https://www.iaea.org/NuclearPower/ Downloads/Technology/meetings/2011-March-TWG-GCR/Day3/ FukushimaDaiichi-Braun-20110330.pdf>. Acessado em 03-Dez-2015.
- [12] BRAY, K. N. C., LIBBY, P. A., 1986, "Passage Times and Flamelet Crossing Frequencies in Premixed Turbulent Combustion", *Combustion Sci*ence and Technology, v. 47, n. 5-6, pp. 253–274.
- [13] BRAY, K. N. C., LIBBY, P. A., MASUYA, G., et al., 1981, "Turbulence Production in Premixed Turbulent Flames", *Combustion Science and Technology*, v. 25, n. 3-4, pp. 127–140.
- [14] BRAY, K., MOSS, J., 1977, "A unified statistical model of the premixed turbulent flame", Acta Astronautica, v. 4, n. 3-4, pp. 291 – 319.
- [15] BREITUNG, W., REDLINGER, R., 1995, "Containment pressure loads from hydrogen combustion in unmitigated severe accidents", *Nuclear Technology*, v. 111, n. 3, pp. 395–419.
- [16] BREITUNG, W., CHAN, C., DOROFEEV, S., et al., 2000, Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Nuclear Safety. Relatório Técnico August, OECD Nuclear Energy Agency.
- [17] BREITUNG, W., DOROFEEV, S., KOTCHOURKO, A., et al., 2005, "Integral large scale experiments on hydrogen combustion for severe accident code validation-HYCOM", *Nuclear Engineering and Design*, v. 235, n. 2-4, pp. 253 – 270.
- [18] BRUNEAUX, G., POINSOT, T., FERZIGER, J. H., 1997, "Premixed flamewall interaction in a turbulent channel flow: budget for the flame surface density evolution equation and modelling", J. Fluid. Mech., , n. 349, pp. 191–219.

- [19] CANDEL, S. M., POINSOT, T. J., 1990, "Flame Stretch and the Balance Equation for the Flame Area", *Combustion Science and Technology*, v. 70, n. 1-3, pp. 1–15.
- [20] CELIK, I. B., GHIA, U., ROACHE, P. J., et al., 2008, "Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications", Journal of Fluids Engineering, v. 130, n. 7 (jul.), pp. 1–4.
- [21] CHAUMEIX, N., BENTAIB, A., 2011, ISP 49-specification of ENACCEF test flame propagation in a hydrogen gradient. Relatório técnico, Tech. Rep., Bureau de Physique des Accidents Graves, IRSN.
- [22] CICCARELLI, G., DOROFEEV, S., 2008, "Flame acceleration and transition to detonation in ducts", Progress in Energy and Combustion Science, v. 34, n. 4 (ago.), pp. 499–550.
- [23] CICCARELLI, G., JOHANSEN, C. T., PARRAVANI, M., 2010, "The role of shock-flame interactions on flame acceleration in an obstacle laden channel", *Combustion and Flame*, v. 157, n. 11, pp. 2125 – 2136.
- [24] CLAVIN, P., 1985, "Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows", Progress in Energy and Combustion Science, v. 11, n. 1, pp. 1 – 59.
- [25] CLAVIN, P., 1988, "Theory of Flames". In: Guyon, E., Nadal, J.-P., Pomeau, Y. (Eds.), *Disorder and Mixing*, v. 152, *NATO ASI Series*, Springer Netherlands, pp. 293–316.
- [26] DAMKOHLER, G., 1940, The effect of turbulence on the flame velocity in gas mixtures. Relatório Técnico No.1112, National Advisory Committee for Aeronautics, November.
- [27] DOROFEEV, S. B., SIDOROV, V. P., DVOINISHNIKOV, A. E., 1996, "Deflagration to Detonation Transition in Large Confined Volume of Lean Hydrogen-Air Mixtures", *Combustion and Flame*, v. 2180, n. 95, pp. 95– 110.
- [28] DOROFEEV, S., SIDOROV, V., VELMAKIN, S., et al., 1993, Large Scale Hydrogen-Air Detonation Experiments. The effect of Ignition Location and Hydrogen Concentration on Load. Relatório Técnico RRCKI-80-05/59, Laboratory of induced Chemical Reactions, Kurchatov Institute.
- [29] DOROFEEV, S., SIDOROV, V., M.S.KUZNETSOV, et al., 2000, "Effect of scale on the onset of detonations", *Shock Waves*, v. 10, pp. 137–149.

- [30] DOROFEEV, S., KUZNETSOV, M., ALEKSEEV, V., et al., 2001, "Evaluation of limits for effective flame acceleration in hydrogen mixtures", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 14, n. 6 (nov.), pp. 583–589.
- [31] DRISCOLL, J. F., 2008, "Turbulent premixed combustion: Flamelet structure and its effect on turbulent burning velocities", *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 34, n. 1, pp. 91 – 134.
- [32] EFIMENKO, A., GAVRIKOV, A., 2008, Large scale Hydrogen-Air detonation experiments. The effect of ignition location and hydrogen concentration on loads. Relatório técnico, Laboratory of Induced Chemical Reactions, Kurchatov Institute, HYSAFE Benchmark Tests.
- [33] EFIMENKO, A., DOROFEEV, S., 2001, "CREBCOM code system for description of gaseous combustion", Journal of Loss Prevention in the Process Industries, v. 14, n. 6 (nov.), pp. 575–581.
- [34] FINESCHI, F. AND KOROLL, G. AND ROHDE, J., I., 2001, Mitigation of hydrogen hazards in water cooled power reactors. Relatório Técnico February, International Atomic Energy Agency.
- [35] GAMEZO, V. N., OGAWA, T., ORAN, E. S., 2008, "Flame acceleration and DDT in channels with obstacles: Effect of obstacle spacing", *Combustion and Flame*, v. 155, n. 1-2 (out.), pp. 302–315.
- [36] GARCIA, J., BARALDI, D., GALLEGO, E., et al., 2010, "An intercomparison exercise on the capabilities of CFD models to reproduce a large-scale hydrogen deflagration in open atmosphere", *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 35, n. 9 (maio), pp. 4435–4444.
- [37] GAVRIKOV, A., EFIMENKO, A., DOROFEEV, S., 2000, "A model for detonation cell size prediction from chemical kinetics", *Combustion and Flame*, v. 120, n. 1-2 (jan.), pp. 19–33.
- [38] HEIDARI, A., FERRARIS, S., WEN, J., et al., 2011, "Numerical simulation of large scale hydrogen detonation", *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 36, n. 3 (fev.), pp. 2538–2544.
- [39] HEITSCH, M., HUHTANEN, R., TÉCHY, Z., et al., 2010, "CFD evaluation of hydrogen risk mitigation measures in a VVER-440/213 containment", *Nuclear Engineering and Design*, v. 240, n. 2 (fev.), pp. 385–396.
- [40] HÓZER, Z., GRIGER, ., MAT, L., et al., 2002, Effect of hydrogen content on the embrittlement of Zr alloys. Relatório técnico, International Atomic

Energy Agency, Vienna, Austria. Fuel behaviour under transient and LOCA conditions. Proceedings of a Technical Committee meeting held in Halden, Norway, 10-14 September 2001.

- [41] JOHANSEN, C., CICCARELLI, G., 2013, "Modeling the initial flame acceleration in an obstructed channel using large eddy simulation", Journal of Loss Prevention in the Process Industries, v. 26, n. 4, pp. 571 – 585.
- [42] JOHANSEN, C. T., CICCARELLI, G., 2009, "Visualization of the unburned gas flow field ahead of an accelerating flame in an obstructed square channel", *Combustion and Flame*, v. 156, n. 2, pp. 405 – 416.
- [43] KESSLER, D., GAMEZO, V., ORAN, E., 2010, "Simulations of flame acceleration and deflagration-to-detonation transitions in methane-air systems", *Combustion and Flame*, v. 157, n. 11 (nov.), pp. 2063–2077.
- [44] KIM, J., HONG, S.-W., 2015, "Analysis of hydrogen flame acceleration in APR1400 containment by coupling hydrogen distribution and combustion analysis codes", Progress in Nuclear Energy, v. 78, n. 0, pp. 101 – 109.
- [45] KIM, J., HONG, S.-W., KIM, S.-B., et al., 2007, "Three-dimensional behaviors of the hydrogen and steam in the APR1400 containment during a hypothetical loss of feed water accident", Annals of Nuclear Energy, v. 34, n. 12 (dez.), pp. 992–1001.
- [46] KOTCHOURKO, A., 2005, Simulation of Combustion Processes in Lean H2air Mixtures: Conservatism of COM3D Results. Relatório técnico, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH.
- [47] KUZNETSOV, M., CICCARELLI, G., DOROFEEV, S., et al., 2002, "DDT in methane-air mixtures", Shock Waves, v. 12, n. 3 (nov.), pp. 215–220.
- [48] LIBBY, P. A., WILLIAMS, F. A., 1982, "Structure of laminar flamelets in premixed turbulent flames", *Combustion and Flame*, v. 44, n. 1-3, pp. 287 – 303.
- [49] MAGNUSSEN, B., HJERTAGER, B., 1977, "On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion", Symposium (International) on Combustion, v. 16, n. 1, pp. 719 - 729.

- [50] MANNINEN, M., SILDE, A., LINDHOLM, I., et al., 2002, "Simulation of hydrogen deflagration and detonation in a BWR reactor building", *Nuclear Engineering and Design*, v. 211, pp. 27–50.
- [51] MARESCA, G., MILELLA, P., PINO, G., 1993, "Structural response of a nuclear power plant steel containment under H2 detonation", Nuclear Engineering and Design, v. 140, n. 1, pp. 119 – 126.
- [52] MARKSTEIN, G., 1964, Nonsteady flame propagation. Agardograph Series. Advisory Group for Aeronautical Research and Development, North Atlantic Treaty Organization.
- [53] MÜLLER, C., BREITBACH, H., PETERS, N., 1994, "Partially premixed turbulent flame propagation in jet flames", Symposium (International) on Combustion, v. 25, n. 1, pp. 1099 – 1106. Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion.
- [54] MULLER, U., BOLLIG, M., PETERS, N., 1997, "Approximations for burning velocities and Markstein numbers for lean hydrocarbon and methanol flames", *Combustion and Flame*, v. 108, n. 3, pp. 349 – 356.
- [55] MOLKOV, V., MAKAROV, D., SCHNEIDER, H., 2007, "Hydrogen-air deflagrations in open atmosphere: Large eddy simulation analysis of experimental data", *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 32, n. 13, pp. 2198 – 2205. ICHS-2005.
- [56] PETERS, N., 1999, "The Turbulent Burning Velocity for Large Scale and Small Scale Turbulence", Journal of Fluid Mechanics, v. 384, pp. 107 – 132.
- [57] PETERS, N., 1999, "Modelling of Production, Kinematic Restoration and Dissipation of Flame Surface Area in Turbulent Combustion". In: Rodi, W., Laurence, D. (Eds.), Engineering Turbulence Modelling and Experiments 4, Elsevier, pp. 49 62, Oxford, .
- [58] PETERS, N., WENZEL, H., WILLIAMS, F., 2000, "Modification of the turbulent burning velocity by gas expansion", *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 28, n. 1, pp. 235 – 243.
- [59] PETERS, N., 2000, Turbulent Combustion. Cambridge Monographs on Mechanics. Cambridge University Press. ISBN: 9780521660822.
- [60] PFÖRTNER, H., SCHNEIDER, H., 1983, Ballonversuche zur Untersuchung der Deflagration von Wasserstoff Luft Gemischen. Relatório técnico, Fraunhöfer Institut für Chemische Technologie.

- [61] PITSCH, H., DE LAGENESTE, L. D., 2002, "Large-Eddy Simulation of Premixed Turbulent Combustion Using a Level-Set Approach". In: Proc. Combust. Inst, pp. 29–2001.
- [62] POINSOT, T., VEYNANTE, D., 2005, Theoretical and Numerical Combustion. Edwards. ISBN: 9781930217102.
- [63] POINSOT, T., HAWORTH, D., BRUNEAUX, G., 1993, "Direct simulation and modeling of flame-wall interaction for premixed turbulent combustion", *Combustion and Flame*, v. 95, n. 1-2, pp. 118 – 132.
- [64] POPE, S., 1988, "The evolution of surfaces in turbulence", International Journal of Engineering Science, v. 26, n. 5, pp. 445 – 469.
- [65] REDLINGER, R., 2008, "DET3D A CFD tool for simulating hydrogen combustion in nuclear reactor safety", *Nuclear Engineering and Design*, v. 238, n. 3 (mar.), pp. 610–617.
- [66] REINECKE, E.-A., HUEBERT, T., TKATSCHENKO, I., et al., 2011, "Integration of experimental facilities: A joint effort for establishing a common knowledge base in experimental work on hydrogen safety", *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 36, n. 3 (fev.), pp. 2700–2710.
- [67] ROYL, P., ROCHHOLZ, H., BREITUNG, W., et al., 2000, "Analysis of steam and hydrogen distributions with PAR mitigation in NPP containments", *Nuclear Engineering and Design*, v. 202, n. 2-3 (dez.), pp. 231–248.
- [68] SARKAR, S., ERLEBACHER, G., HUSSAINI, M. Y., et al., 1991, "The analysis and modelling of dilatational terms in compressible turbulence", *Journal of Fluid Mechanicschanics*, n. 227, pp. 473–491.
- [69] SATHIAH, P., KOMEN, E., ROEKAERTS, D., 2012, "The role of CFD combustion modeling in hydrogen safety management:Part I: Validation based on small scale experiments", *Nuclear Engineering and Design*, v. 248 (jul.), pp. 93–107.
- [70] SATHIAH, P., KOMEN, E., ROEKAERTS, D., 2015, "The role of CFD combustion modeling in hydrogen safety management - III: Validation based on homogeneous hydrogen-air-diluent experiments", *Nuclear Engineering* and Design, v. 289, n. 0, pp. 296 – 310.
- [71] SCHOLTYSSEK, W., BIELERT, U., DOROFEEV, S., et al., 2003, "Integral Large Scale Experiments on Hydrogen Combustion for Severe Accident Code Validation (HYCOM)". In: *FISA*, pp. 1–6, November.

- [72] SHERMAN, M. P., BERMAN, M., 1987, The Possibility of Local Detonations During Degraded-Core Accidents in the Bellefonte Nuclear Power Plant. Relatório técnico, U.S.Nuclear Regulatory Commission.
- [73] SPALDING, D., 1971, "Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames". In: *Thirteenth symposium (international) on combustion*, pp. 649–657. The combustion institute.
- [74] STAMPS, D., BENEDICK, W., TIESZEN, S., 1991, Hydrogen-Air-Diluent Detonation Study for Nuclear Reactor Safety Analyses. Relatório técnico, Sandia National Laboratories; US.Nuclear Regulatory Commission, Albuquerque, NM.
- [75] THOMAS, J., PAUL, A., INAKI, A., et al., 2011, "Achievements of the EC network of excellence HySafe", *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 36, n. 3 (fev.), pp. 2656–2665. ISSN: 03603199.
- [76] TROUVÉ, A., POINSOT, T., 1994, "The evolution equation for the flame surface density", J. Fluid Mech., n. 278, pp. 1–31.
- [77] UETSUKA, H., TRICOT, N., MAKIHARA, Y., et al., 2007, Computational Analysis of the Behaviour of Nuclear Fuel Under Steady State, Transient and Accident Conditions. Relatório técnico, International Atomic Energy Agency, Vienna.
- [78] VELIKORODNY, A., STUDER, E., KUDRIAKOV, S., et al., 2015, "Combustion modeling in large scale volumes using EUROPLEXUS code", Journal of Loss Prevention in the Process Industries, v. 35, pp. 104 – 116.
- [79] VEYNANTE, D., VERVISCH, L., 2002, "Turbulent combustion modeling", *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 28, n. 3, pp. 193 – 266.
- [80] WEIGHTMAN, M., JAMET, P., LYONS, J. E., et al., 2011, IAEA International Fact Finding Expert Mission of the Fukushima Dai-ichi NPP Accident following the Great East Japan Earthquake and Tsunami. Relatório Técnico June, IAEA.
- [81] WILCOX, D., 1994, Turbulence Modeling for CFD. DCW Industries. ISBN: 9780963605108.
- [82] WOODWARD, P., COLELLA, P., 1984, "The numerical simulation of twodimensional fluid flow with strong shocks", *Journal of Computational Physics*, v. 54 (abr.), pp. 115–173.

- [83] YANEZ, J., KOTCHOURKO, A., LELYAKIN, A., et al., 2011, "A comparison exercise on the CFD detonation simulation in large-scale confined volumes", *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 36, n. 3 (fev.), pp. 2613–2619.
- [84] YANG, J., MUSICKI, Z., NIMNUAL, S., 1991, Hydrogen Combustion, Control, and Value-impact Analysis for PWR Dry Containments. Relatório Técnico v. 88, Division of Safety Issue Resolution, Office of Nuclear Regulatory Research, U.S. Nuclear Regulatory Commission, Brookhaven National Laboratory, Jun.
- [85] ZBIKOWSKI, M., MAKAROV, D., MOLKOV, V., 2010, "Numerical simulations of large-scale detonation tests in the RUT facility by the LES model." *Journal of hazardous materials*, v. 181, n. 1-3 (set.), pp. 949–56.
- [86] ZEMAN, O., 1990, "Dilatation dissipation: the concept and application in modeling compressible mixing layers", *Physics of Fluids*, , n. 2, pp. 178– 188.
- [87] ZIMONT, V., POLIFKE, W., BETTELINI, M., et al., 1998, "An Efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion at High Reynolds Numbers Based on a Turbulent Flame Speed Closure", J. Eng. Gas Turbines Power, v. 120(3), pp. 526–532.
- [88] ZIMONT, V., 2000, "Gas premixed combustion at high turbulence. Turbulent flame closure combustion model", *Experimental Thermal and Fluid Sci*ence, v. 21, n. 1-3, pp. 179 – 186.
- [89] ZIMONT, V., BATTAGLIA, V., 2005, "Joint RANS/LES approach to premixed flames modelling in the context of the TFC combustion model". In: *Engineering Turbulence Modelling and Experiments 6*, Elsevier Science B.V., pp. 905 – 914, Amsterdam.