

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

IMPLEMENTAÇÃO DE MODELOS ATUALIZADOS DE GÁS CINZA NO SOFTWARE
FDS PARA PREDIÇÃO DO FLUXO DE CALOR RADIATIVO EM INCÊNDIOS

por

Cássio Spohr Fernandes

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Maio de 2018

IMPLEMENTAÇÃO DE MODELOS ATUALIZADOS DE GÁS CINZA NO SOFTWARE
FDS PARA PREDIÇÃO DO FLUXO DE CALOR RADIATIVO EM INCÊNDIOS

por

Cássio Spohr Fernandes
Engenheiro Mecânico

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Energia

Orientador: Prof. Dr. Felipe Roman Centeno

Aprovada por:

Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França, PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Adriane Prisco Petry, PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Maria Luiza Sperb Indrusiak, RNC

Prof. Dr. Jakson M. Vassoler
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 28 de Maio de 2018

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço à minha família pelo apoio, incentivo e compreensão durante todo o decorrer do mestrado. Agradeço também ao professor Felipe pelos ensinamentos, amizades e orientação no decorrer dos estudos.

Agradeço aos meus amigos e colegas que me apoiaram e contribuíram de alguma forma durante esta jornada.

À Universidade Federal do Rio Grande do Sul, à escola de Engenharia e ao PROMEC que possibilitaram a realização deste trabalho.

Às agências de fomento CAPES e CNPq pelo aporte financeiro indispensável para esta dissertação.

RESUMO

Este trabalho tem como objetivo implementar e testar modelos de gás cinza atualizados na rotina de radiação térmica do software *Fire Dynamics Simulator* (FDS), além da utilização do próprio modelo de gás cinza disponível no software, para a predição do fluxo de calor radiativo. Os modelos de gás cinza estudados foram o modelo padrão do software FDS (aqui denominado como GC₁), e os modelos de gás cinza mais atuais: o GC₂, no qual o coeficiente de absorção do meio participante é dado por relações polinomiais, e o GC₃, sendo este um modelo de gás cinza que baseia o cálculo do coeficiente de absorção no modelo WSGG. Os novos modelos de gás cinza foram implementados no código fonte do software FDS, o qual é um código aberto, e a verificação da implementação foi realizada através da solução numérica do equacionamento utilizando os valores reportados pelo software. Com os novos modelos de gás cinza já corretamente implementados, passou-se então para a simulação computacional dos casos previamente selecionados. Para todos os modelos de gás cinza, foram simulados incêndios em poças, para diferentes combustíveis (etanol, n-heptano e metanol) em diferentes cenários de incêndio, considerando ou não a presença de fuligem no sistema. Os cenários de incêndio eram: (i) totalmente fechado, (ii) totalmente aberto e (iii) com uma condição intermediária, fechado, porém com uma abertura para o meio externo. Um estudo de análise de malha e de diferentes parâmetros, como o estudo da quantidade necessária de ângulos sólidos discretos, foram realizados para correta padronização dos parâmetros. As simulações computacionais foram validadas para o modelo de gás cinza padrão do FDS através da comparação de resultados com aqueles reportados na literatura específica de cada caso. Com os modelos já validados simulou-se novamente cada cenário de incêndio com os diferentes modelos de gás cinza anteriormente implementados. A partir da análise dos resultados obtiveram-se boas concordâncias para os campos de temperatura, frações molares tanto de CO₂ quanto de H₂O e para as frações volumétricas de fuligem. Os fluxos de calor radiativos foram corretamente preditos para todos os modelos de gás cinza implementados. O modelo GC₂ apresentou resultados com desvios médios na faixa de 15%, o modelo de gás cinza baseado no WSGG (GC₃) apresentou os melhores resultados, com erros médios inferiores a 10%, enquanto que o modelo padrão do software, GC₁, apresentou resultados intermediários.

Palavras-chave: Fluxo de calor radiativo; Modelo de gás cinza; Radiação térmica; FDS.

ABSTRACT

This work aims to implement and test updated gray gas models in the thermal radiation routine of the Fire Dynamics Simulator (FDS) software, as well as the use of the gray gas model available in the software to the prediction of radiative heat flux. The gray gas models studied were the default model of the FDS software (determined GC_1), and the most current gray gas models: the GC_2 , in which the absorption coefficient of the participant medium is given by a polynomial relations, and the GC_3 , which is a gray gas model that was based on the calculation of the absorption coefficient in the WSGG model. The most recently gray gas models were implemented in the source code, which is an open source, and the verification of the implementation was performed by the numerical solution of the equations from the reported values of the software. With the new gray gas models already implemented, the next step was the computational simulation of the previously selected cases. For all the gray gas models, pool fires were simulated different scenarios of fire for different fuels (ethanol, n-heptane and methanol), with and without considering soot presence in the system. The fire scenarios were: (i) fully closed, (ii) fully open and (iii) with an intermediate condition, closed but with an opening to the external environment. A study of a mesh analysis and different parameters, such as the study of the required amount of discrete solid angles, were performed to correct the standard parameters. The computational simulations were verified for the default gray gas model of the FDS by comparing the simulations results with those reported in the specific literature of each case. With the models already verified, each fire scenario was simulated with the different gray gas models previously implemented. From the analysis of the results, good agreements were obtained for the fields of temperature, molar fraction of CO_2 and H_2O and soot volume fraction. The radiative heat fluxes were correctly predicted for all gray gas models early implemented. The GC_2 model present results with average deviation in the range of 15%, the gray gas model based on WSGG (GC_3) presented the best results, with average deviation lower than 10%, while the default software model (GC_1) presented intermediate results.

Keywords: Radiative heat flux; Gray gas model; Thermal radiation; FDS.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO.....	1
1.1	Revisão bibliográfica.....	1
1.2	Objetivos.....	7
1.2.1	Principais objetivos.....	7
1.2.2	Objetivos específicos.....	7
1.3	Organização do texto.....	8
2	EQUAÇÕES FUNDAMENTAIS.....	10
2.1	Equação de Conservação de Massa.....	10
2.2	Equação da Quantidade de Movimento.....	10
2.3	Equação da Conservação de Energia.....	11
2.4	Equação da Conversação de Espécies.....	12
2.5	Modelagem de turbulência.....	12
2.5.1	Simulação de grandes escalas (LES).....	12
2.5.2	O Formalismo LES.....	13
2.5.3	Equações fundamentais filtradas.....	14
2.5.4	Modelo de Smagorinsky.....	15
2.5.5	Modelo de Deardorff.....	16
2.5.6	Medida de resolução da turbulência (MTR).....	17
2.6	Modelo de combustão.....	18
2.6.1	Aproximação de espécies aglomeradas.....	19
2.6.2	Relação entre espécies primitivas e aglomeradas.....	20
2.7	Modelagem da radiação térmica.....	23
2.7.1	Corpo negro.....	24
2.7.2	Intensidade de radiação.....	25
2.7.3	Equação da transferência radiativa (RTE).....	27
2.7.4	Termo fonte de emissão.....	28
2.7.5	Contribuição da radiação na equação da energia.....	28
2.7.6	Discretização angular (discretização do ângulo sólido).....	29
2.7.7	Discretização espacial.....	31
2.7.8	Condições de contorno da radiação.....	33
2.7.9	Formação e efeitos da fuligem.....	34
2.8	Modelagem do coeficiente de absorção.....	35

2.8.1	Modelo de gás cinza padrão do FDS (GC ₁).....	37
2.8.2	Modelo de gás cinza de Cassol et al., 2015 (GC ₂).....	38
2.8.3	Modelo de gás cinza baseado no WSGG (GC ₃).....	40
3	METODOLOGIA.....	45
3.1	O software <i>Fire Dynamics Simulator</i> (FDS).....	45
3.2	Descrição dos casos de incêndio.....	48
3.2.1	Configurações geométricas.....	48
3.2.2	Condições iniciais e condições de contorno.....	52
3.2.3	Propriedades termofísicas e termoquímicas dos materiais e parâmetros das simulações.....	53
4	VERIFICAÇÃO.....	55
4.1	Estudo da discretização espacial: qualidade de malha.....	55
4.2	Estudo da discretização do ângulo sólido.....	58
4.3	Comparação com resultados da literatura.....	60
4.4	Verificação dos modelos de gás cinza.....	63
5	RESULTADOS.....	65
5.1	Resultados obtidos para o caso 1 – Tu et al., 2013.....	65
5.2	Resultados obtidos para o caso 2 – Lin et al., 2010.....	73
5.3	Resultados obtidos para o caso 3 – Sahu et al., 2015.....	81
6	CONCLUSÃO.....	92
6.1	Trabalhos futuros.....	93
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	95
	APÊNDICE A – METODOLOGIA PARA O CÁLCULO DO FLUXO DE CALOR RADIATIVO.....	101
	APÊNDICE B – DEMAIS RESULTADOS PARA O CASO DE LIN ET AL., 2010.....	104

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Efeitos atmosféricos da radiação solar [adaptado de Siegel e Howell, 2016].....	23
Figura 2.2	Espectro da radiação de ondas eletromagnéticas (comprimento de onda no vácuo) [adaptado de Siegel e Howell, 2016].....	24
Figura 2.3	Intensidade de emissão espectral de uma superfície negra [adaptado de Siegel e Howell, 2002].....	26
Figura 2.4	Hemisfério que caracteriza as relações de ângulos sólidos, a fim de definição [adaptado de Siegel e Howell, 2016].....	30
Figura 2.5	Espectro do coeficiente de absorção de H ₂ O para $T = 2000$ K e $p_{H_2O} = 0,1$ atm [adaptado de Mossi et al., 2012].....	36
Figura 2.6	Representação de gases cinzas modelos através do WSGG [adaptado de Cassol et al., 2014].....	41
Figura 3.1	Caso 1 – Tu et al., 2013: (a) Domínio computacional empregado e (b) Aparato experimental.....	49
Figura 3.2	Caso 2 – Lin et al., 2010: (a) Domínio computacional e (b) Geometria do recipiente [adaptado de Lin et al., 2010].....	50
Figura 3.3	Caso 3 – Sahu et al., 2015: domínio computacional e instrumentação [adaptado de Sahu et al., 2015].....	51
Figura 4.1	Comparação da temperatura medida pelo termopar T_1 para todas as malhas testadas.....	56
Figura 4.2	Influência da discretização da malha computacional na forma da chama.....	57
Figura 4.3	Histórico de temperatura no termopar T_1 para diversas discretizações do ângulo sólido discreto (entre 100 e 1250 ângulos sólidos discretos).....	59
Figura 4.4	Distribuição do fluxo de calor radiativo para diferentes ângulos sólidos discretos.....	60
Figura 4.5	Comparação do histórico de temperatura do termopar T_1 : resultado numérico do presente trabalho × dados experimentais de Tu et al., 2013.....	61
Figura 4.6	Exemplo do intervalo de tempo aproximado em regime médio permanente para o cálculo dos resultados.....	62
Figura 4.7	Coefficientes de absorção obtidos para cada modelo de gás cinza implementado, no tempo $t = 200$ s para o caso de Lin et al., 2010: (a)	64

	GC ₂ , (b) GC ₁ e (c) GC ₃	
Figura 5.1	Campos no plano central da poça do caso 1, em diversos instantes de tempo, para as simulações sem fuligem utilizando o modelo GC ₁ : (a) temperatura, (b) fração molar de CO ₂ e (c) fração molar de H ₂ O.....	66
Figura 5.2	Perfis ao longo da linha de centro da poça para as simulações sem fuligem do caso 1, para os diversos modelos de gás cinza, no intervalo de tempo de 180 s até 530 s: (a) temperatura e (b) frações molares de CO ₂ e H ₂ O.....	68
Figura 5.3	Campos no plano central da poça, em diversos instantes de tempos, para as simulações sem fuligem do caso 1, utilizando o modelo GC ₁ : (a) temperatura, (b) fração molar de CO ₂ e (c) fração molar de H ₂ O e (d) fração volumétrica de fuligem.....	70
Figura 5.4	Perfis ao longo da linha de centro da poça para as simulações com fuligem do caso 1, para diversos modelos de gás cinza, no intervalo de tempo entre 180 s e 530 s: (a) temperatura, (b) frações molares de CO ₂ e H ₂ O e (c) fração volumétrica de fuligem.....	71
Figura 5.5	Campos no plano central da poça, em diversos tempos, para as simulações sem fuligem do caso 2, utilizando o modelo GC ₃ : (a) temperatura, (b) fração molar de CO ₂ e (c) fração molar de H ₂ O.....	75
Figura 5.6	Perfis ao longo da linha de centro da poça para as simulações sem fuligem do caso 2, para os diversos modelos de gás cinza, no intervalo de tempo de 100 s a 300 s: (a) distribuição de temperatura e (b) distribuição das frações molares de CO ₂ e H ₂ O.....	76
Figura 5.7	Campos no plano central da poça, em diversos tempos, para as simulações sem fuligem do caso 2, utilizando o modelo GC ₃ : (a) temperatura, (b) fração molar de CO ₂ e (c) fração molar de H ₂ O e (d) fração volumétrica de fuligem.....	77
Figura 5.8	Perfis ao longo da linha de centro da poça para as simulações com fuligem do caso 2, para diversos modelos de gás cinza, no intervalo de tempo de 100 s até 300 s: (a) temperatura, (b) frações molares de CO ₂ e H ₂ O e (c) fração volumétrica de fuligem.....	79
Figura 5.9	Fluxo de calor radiativo em todas as posições para todos os modelos de gás cinza em comparação ao resultado experimental de Lin et al., 2010, considerando: (a) sem fuligem (b) com fuligem.....	80
Figura 5.10	Campos no plano central da poça, em diversos tempos, para as	83

	simulações sem fuligem do caso 3, utilizando o modelo GC ₂ : (a) temperatura, (b) fração molar de CO ₂ e (c) fração molar de H ₂ O.....	
Figura 5.11	Perfis ao longo da linha de centro da poça para as simulação sem fuligem do caso 3, para os diversos modelos de gás cinza, no intervalo de tempo de 200 s até 550 s: (a) distribuição de temperatura e (b) distribuição das frações molares de CO ₂ e H ₂ O.....	84
Figura 5.12	Campos no plano central da poça, em diversos tempos, para as simulações sem fuligem do caso 3, utilizando o modelo GC ₂ : (a) temperatura, (b) fração molar de CO ₂ e (c) fração molar de H ₂ O e (d) fração volumétrica de fuligem.....	86
Figura 5.13	Perfis ao longo da linha de centro da poça para as simulações com fuligem do caso 3, para diversos modelos de gás cinza, no intervalo de tempo de 100 s até 1000 s: (a) distribuição da temperatura, (b) distribuição das frações molares de CO ₂ e de H ₂ O e (c) distribuição da fração volumétrica de fuligem.....	88
Figura 5.14	Fluxos de calor incidente para diferentes modelos de gás cinza, com e sem fuligem, e em diferentes posições do domínio: (a) altura de 1 m (sem fuligem), (b) altura de 3 m (sem fuligem), (c) altura de 1 m (com fuligem) e (d) altura de 3 m (com fuligem).....	91
Figura A.1	Fluxo de calor radiativo temporal obtido para o radiômetro 4 utilizando o modelo GC ₃ para o caso de Lin et al., 2010.....	101
Figura A.2	Fluxo de calor incidente temporal obtido na altura de 3 m, na parede em que existe a porta, utilizando o modelo GC ₂ , sem fuligem para o caso de Sahu et al., 2015.....	102
Figura A.3	Fluxo de calor incidente temporal obtido na altura de 3 m, na parede em que existe a porta, utilizando o modelo GC ₂ , com fuligem para o caso de Sahu et al., 2015.....	103

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1	Coeficientes polinomiais para o cálculo do coeficiente de absorção do modelo GC ₂ de Cassol et al., 2015.....	39
Tabela 2.2	Coeficientes WSGG para H ₂ O com quatro gases cinza de Cassol et al., 2014.....	42
Tabela 2.3	Coeficientes WSGG para CO ₂ com quatro gases cinza de Cassol et al., 2014.....	42
Tabela 2.4	Coeficientes WSGG para fuligem com quatro gases cinza de Cassol et al., 2014.....	42
Tabela 3.1	Propriedades termofísicas e termoquímicas dos combustíveis e parâmetros das simulações.....	54
Tabela 4.1	Comparação de resultados para diferentes malhas testadas.....	57
Tabela 4.2	Comparação de máxima temperatura, altura de chama e fluxos de calor radiativo em R ₁ e R ₂ : resultados numéricos do FDS × dados experimentais de Tu et al., 2013.....	63
Tabela 5.1	Fluxos de calor radiativo obtido para os diferentes modelos de gás cinza utilizados junto com os seus respectivos desvios percentuais.....	73
Tabela 5.2	Desvios percentuais médios para o fluxo de calor radiativo em simulações com e sem fuligem, e desvios percentuais na posição referente ao máximo fluxo de calor para a simulação com fuligem, para os modelos GC ₁ , GC ₂ e GC ₃	81
Tabela 5.3	Cálculo dos desvios relacionados aos fluxos de calor incidente reportados pela Figura 5.14 em comparação aos valores obtidos por Sahu et al., 2015.....	90
Tabela B.1	Fluxos de calor radiativo para o modelo GC ₁	104
Tabela B.2	Fluxos de calor radiativo para o modelo GC ₂	104
Tabela B.3	Fluxos de calor radiativo para o modelo GC ₃	105

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

CAPES	Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior
CFD	Dinâmica de fluidos computacional (<i>Computational Fluid Dynamics</i>)
CFL	Critério de Courant-Friedrichs-Lewy
CNPq	Conselha Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico
CW	Modelo do número de onda cumulativo
DNS	Simulação numérica direta (<i>Direct Numerical Simulation</i>)
FDS	<i>Fire Dynamics Simulator</i>
FSCK	Modelo de distribuição k -correlacionado para espectro completo (<i>Full-Spectrum Correlated-k</i>)
FSK	Modelo da distribuição- k que considera todo o espectro
GC	Modelo de gás cinza (<i>Gray Gas</i>)
GC ₁	Modelo de gás cinza padrão do software FDS
GC ₂	Modelo de gás cinza de Cassol et al., 2015
GC ₃	Modelo de gás cinza baseado no WSGG desenvolvido por Cassol et al., 2014
HITEMP	Banco de dados espectral para espécies a 1000K
LBL	Método linha-por-linha (<i>Line-By-Line</i>)
LES	Simulação de grandes escalas (<i>Large-Eddy Simulation</i>)
MTR	Medida de resolução da turbulência (<i>Measure of Turbulence Resolution</i>)
NIST	<i>National Institute of Standards and Technology</i>
RANS	Simulação com médias de Reynolds (<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>)
RTE	Equação da transferência radiativa (<i>Radiation Transfer Equation</i>)
SLW	Modelo de soma-ponderada-de-gases-cinza baseada em linhas espectrais (<i>Spectral Line-based WSGG</i>)
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul
VTT	<i>Technical Research Centre of Finland</i>
WSGG	Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (<i>Weighted-Sum-of-Gray-Gases</i>)

LISTA DE SÍMBOLOS

a	Coeficiente de temperatura no modelo WSGG
A	Área, m ²
A	Matriz transformação de espécie aglomerada
A_m	Área da célula, m ²
b_{χ_j}	Coeficientes polinomiais da função do coeficiente de temperatura no modelo WSGG ($k = 1, 2 \dots, N_K$), K ^(1-k)
B	Termo fonte da emissão na RTE
C_s	Constante de Smagorinsky, 0,2
C_v	Constante de Deardorff, 0,1
c_0	Velocidade da luz no vácuo, $2,998 \times 10^8$ m/s
D	Diâmetro, m
D_m	Integração dos vetores normais ao sistema de coordenadas em todos os ângulos sólidos discretos
e	Energia interna específica, J/kg
E	Poder emissivo de radiação, W/m ²
E_b	Poder emissivo de radiação do corpo negro, W/m ²
F_i	Componente do vetor \mathbf{F} na direção i , m/s ²
F	Vetor do fluxo de quantidade de movimento, m/s ²
f_v	Fração volumétrica de fuligem
h	Constante de Planck, $6,626 \times 10^{-34}$ J·s
h_s	Entalpia específica sensível, J/kg
i, j, k	Índices do volume finito nas direções x, y e z
$\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$	Vetores unitários nas direções dos eixos principais
I	Intensidade de radiação, W/(m ² sr)
I_b	Intensidade de radiação de corpo negro, (W/(m ² sr))
k_{sgs}	Parcela na escala sub-malha da energia cinética do escoamento por unidade de massa, m ² /s ²
k_B	Constante de Boltzmann, $1,381 \times 10^{-23}$ J/K
L	Comprimento característico (<i>path length</i>), m
M	Critério de Pope, 2004
N_e	Número de vórtices no método dos vórtices sintéticos
N_G	Número de gases cinza no modelo WSGG
N_m	Número de volumes finitos da discretização
N_K	Grau do polinômio que caracteriza o coeficiente de temperatura no modelo

WSGG

$N\theta$	Número de bandas em que a esfera unitária é dividida na direção polar
$N\varphi$	Número de bandas em que a esfera unitária é dividida na direção azimutal
$N\Omega$	Número total de ângulos de controle
n_m	Vetor unitário normal à face
P	Pressão parcial, Pa
p	Pressão parcial, Pa
q_r	Taxa de transferência de calor por radiação, W
q_r''	Vetor fluxo de calor radiativo, W/m ²
q'''	Taxa volumétrica de geração interna de energia, W/m ³
V	Volume da célula, m ³
T_w	Temperatura na parede, K
s	Vetor unitário
P_i	Pressão para a espécie i
W	Massa molecular
Re	Número de Reynolds
s	Vetor direção
s	Posição espacial
S_r	Termo fonte radiativo, W/m ³
T	Temperatura, K ou °C
t	Tempo, s
u, v, w	Componentes ortogonais de velocidade, m/s
V	Volume, m ³
\mathbf{x}	Vetor posição, m
x, y, z	Coordenadas cartesianas, m
X_i	Componente da força de corpo atuando na direção i , N/m ³
Z_A	Fração mássica de espécie aglomerada de ar
Z_F	Fração mássica de espécie aglomerada de combustível

Letras gregas

α	Índice de espécie aglomerada
β	Termo independente na equação da transferência radiativa discretizada, W
Δ	Tamanho característico do filtro na simulação de grandes escalas, m
Δt	Passo de tempo, s
δ_{ij}	Operador delta de Kronecker, 1 ou 2
$\delta x, \delta y, \delta z$	Dimensões do volume finito nas direções dos eixos coordenados x, y e z ,

	respectivamente, m
$\delta\Omega$	Tamanho do ângulo de controle
ε	Emissividade
η	Número de onda, cm^{-1}
θ	Ângulo polar
θ^+	Limite superior da banda θ
θ^-	Limite inferior da banda θ
κ	Coefficiente de absorção, m^{-1}
κ_p	Coefficiente de absorção baseado na pressão, $\text{atm}^{-1}\text{m}^{-1}$
κ_{fv}	Coefficiente de absorção baseado na fração volumétrica de fuligem, atm m^{-1}
λ	Comprimento de onda
μ	Viscosidade dinâmica, Pa s
ρ	Massa específica, kg/m^3
σ	Constante de Stefan-Boltzmann,
τ	$5,6704 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$
Φ	Dissipação viscosa, s^{-2}
φ	Ângulo azimutal
χ	Espécie química genérica
Ω	Ângulo sólido correspondente ao vetor direção s

Subscritos

$(\cdot)_{ijk}$	Grandeza avaliada na célula i, j e k
$(\cdot)_{max}$	Valor máximo
$(\cdot)_{min}$	Valor mínimo
$(\cdot)_{\chi}$	Grandeza correspondente à espécie química χ

Sobrescritos

$\langle(\cdot)\rangle$	Média temporal
$(\cdot)''$	Grandeza por unidade de área
$(\cdot)^+$	Limite superior da banda angular
$(\cdot)^-$	Limite inferior da banda angular
$(\bar{\cdot})$	Média aritmética da grandeza avaliada em todas as faces do volume computacional
$(\overline{\cdot})$	Grandeza espacialmente filtrada
$(\tilde{\cdot})$	Grandeza filtrada pelo filtro Favre

1 INTRODUÇÃO

A radiação térmica é um dos mais importantes modos de transferência de calor em incêndios, tanto em pequenas quanto em grandes escalas. Incêndios têm sido estudados desde a década de 1970 e representam um sério perigo a diversas aplicações como mostram os estudos de Babrauskas, 1983; Mudan, 1984.

A transferência de calor radiativa em meios participantes é descrita pela solução da equação de transferência radiativa (RTE, do inglês *Radiative Transfer Equation*). Essa equação surge do balanço de energia radiativa em determinado domínio e é uma equação íntegro-diferencial [Howell et al., 2016]. De modo geral, essa equação expressa a conservação de energia radiativa ao longo de um meio e introduz os conceitos de intensidade de radiação, absorção, espalhamento e coeficiente de extinção. A solução desta equação não é algo trivial, pois a mesma requer integração espectral, direcional e espacial, além de considerar outros fatores (como o coeficiente de absorção) que dependem, por exemplo, do estado termodinâmico local.

Os modelos numéricos também evoluíram no decorrer das últimas décadas. Assim, sendo possível prever fluxos de calor, temperaturas, velocidade de escoamento, fuligem e diversos outros parâmetros, fazendo com que cada vez mais se utilize modelos numéricos para a solução de problemas de engenharia de modo geral. A disponibilidade computacional aliada ao desenvolvimento de algoritmos para a solução de diversos problemas tem recebido enorme atenção, fazendo aumentar o número de pesquisadores e usuários de simulação numérica [Maliska, 2004]. Nesse contexto observa-se cada vez mais a disponibilidade e utilização de códigos comerciais de dinâmica dos fluidos computacional (CFD, do inglês *Computational Fluid Dynamics*) disponíveis. Alguns exemplos desses códigos CFD são FLUENT®, OPENFOAM®, STAR-CD® e *Fire Dynamics Simulator* (FDS). Especificamente em incêndios a utilização de CFD é de grande valia, pois o seu emprego diminui os riscos que existem nos procedimentos experimentais e viabilizam a realização de estudos em diversas escalas, inclusive em escala real.

1.1 Revisão bibliográfica

Incêndio tem sido um importante tema abordado em pesquisas desde a década de 1970. Um dos pioneiros na área, Modak, 1977, estudou um incêndio em poça empregando geometria axissimétrica e especificando parâmetros como temperatura e coeficiente de absorção da chama buscando calcular o fluxo de calor radiativo distante da chama, as

variações do fluxo de calor na superfície do combustível e também a radiação total do incêndio. Assim, constatou que o fluxo de calor radiativo da chama é máximo no centro da poça e diminui conforme se aproxima da extremidade do incêndio. Tentou-se fornecer uma base para prever o comportamento de incêndios em larga escala. Tendo em vista que a radiação térmica é o principal mecanismo de transferência de calor em incêndios, constatou-se que a partir do modelo para incêndios de pequenas escalas não é possível obter um modelo para incêndios de grandes escalas.

Mudan, 1984, revisou os vários modelos e dados experimentais disponíveis na literatura para taxas de queima, diâmetro e altura de chama, fluxo de calor radiativo e poder emissivo em incêndios em poças de hidrocarbonetos combustíveis. Além de vários combustíveis, também foram analisadas as características geométricas das poças. Em suma, os resultados obtidos da análise dos modelos e suas correlações podem ser utilizados para obter um algoritmo que é capaz de determinar a radiação térmica de incêndios em grandes poças de hidrocarbonetos.

Posteriormente Fischer et al., 1987, estudaram a estrutura e radiação de uma chama em um incêndio em poça de etanol com 0,5 m de diâmetro queimando livremente dentro de uma sala ventilada. Esse estudo foi feito através de análise experimental e posteriormente foi utilizado um modelo para prever a radiação. A temperatura foi medida usando termopares, analisando a evolução temporal das temperaturas. A partir desses dados foi possível o ajuste de correlações para as temperaturas. Os gases provenientes da combustão também foram medidos, assim como o coeficiente de extinção da fuligem, e a dependência temporal do campo de temperatura. O modelo desenvolvido por Leyer et al., 1986, foi utilizado para se obter a intensidade de radiação do incêndio. Como resultados, se obteve uma base de dados para modelagem estrutural e de radiação de incêndios utilizando temperatura e a composição média no tempo, a qual subestimava a intensidade de radiação em relação à medida experimentalmente. Um segundo modelo foi utilizado para prever as intensidades de radiação e, mesmo mostrando melhores resultados, ainda subestimava os valores medidos.

Posteriormente, Longenbaugh e Matthews, 1992, mediram os fluxos de calor radiativo de incêndios em poças, incluindo casos com emissão de fuligem. Essas medições de fluxos de calor radiativo combinados com as medições de temperatura da chama foram acopladas com modelos matemáticos para estimar parâmetros não-lineares da RTE. Sabendo que a solução da RTE é extremamente complexa, assumiram-se algumas considerações para simplificar o modelo utilizado. Algumas das simplificações utilizadas foram que o espalhamento pode ser negligenciado, o campo dimensional da radiação era unidimensional, as propriedades radiativas do fogo eram aquelas de um emissor e absorvedor cinza. A partir de experimentos e

estimativas analíticas observou-se que o espalhamento não é significativo em grandes incêndios. Concluiu-se também que o modelo utilizado fornece um método para estimar os coeficientes médios de absorção da chama, considerando as distribuições de fluxo de calor radiativo e temperatura da chama.

Klassen e Gore, 1994, calcularam as intensidades radiativas e os fluxos de calor radiativo em incêndios em poças de tolueno usando uma série de temperaturas e frações volumétricas de fuligem. Eles concluíram que o uso de valores médios de frações volumétricas e temperatura pode resultar em uma subestimação das intensidades radiativas e fluxos de calor radiativos.

Choi et al., 1993, buscaram compreender os mecanismos que regem as taxas de gaseificação e o fluxo de calor radiativo que retorna para a superfície do combustível. Utilizaram uma técnica de 3 linhas de emissão/absorção para medir a temperatura e a fração volumétrica da fuligem em incêndios em poças de heptano. Os resultados temporais e espaciais foram utilizados para determinar o fluxo de calor radiativo que retorna para a superfície da poça e a taxa de queima usando o método Monte Carlo inverso, comparando os resultados com os valores medidos. Nesse estudo foi encontrado que a média da fração volumétrica da fuligem para um incêndio de heptano é de uma ordem de grandeza menor quando comparado com incêndios de tolueno. Porém, a temperatura é alguns graus mais elevada do que em incêndios de tolueno.

Continuando seus estudos, Choi et al., 1994, mediram a temperatura, fração volumétrica de fuligem e CO_2 em um incêndio em poça de heptano com 10 cm de diâmetro. O fluxo de calor radiativo que retorna para a superfície do combustível foi calculado usando o método de Monte Carlo inverso juntamente com o modelo RADCAL, empregado para o cálculo do coeficiente de absorção dos gases participantes. Os resultados indicaram que, no caso estudado, os produtos gasosos representam uma fração significativa da transferência de calor radiativa total.

De Ris et al., 2000, reproduziram o comportamento de um incêndio em poça de grande escala usando incêndios em escala reduzida modelados em alta pressão. Preservaram-se os fluxos de calor e os tempos de queima em incêndios em grande escala aumentando a pressão ambiente, enquanto manteve-se constante o produto da escala de comprimento pelo quadrado da pressão ($l.p^2$). Para a modelagem de radiação duas hipóteses foram assumidas: (i) o fluxo de calor da chama vinha principalmente da radiação da fuligem, e (ii) a emissão de fuligem era caracterizada pelo ponto de fumaça do combustível. O conceito de modelagem foi testado e confirmado por uma série de experimentos de incêndios em escala reduzida realizados em pressões de até 2,5 atm.

McGrattan et al., 2000, desenvolveram uma nova metodologia para calcular o fluxo de calor radiativo em grandes incêndios em poças de combustíveis líquidos e gasosos. Essa então nova metodologia era similar àquela descrita por Atallah e Drake, 1975, nas diretrizes do DHUD (do inglês, *Department of Housing and Urban Development*), porém a predição do tamanho do incêndio e a intensidade de radiação foi aperfeiçoada. Tal metodologia permitiu uma maior flexibilidade em cenários de incêndios, permitindo a utilização de diferentes geometrias, além daquelas idealizadas que eram utilizadas em experimentos e análises teóricas, permitindo análises mais detalhadas em casos de maior complexidade.

Snegirev, 2004, incorporou um método estatístico para transferência de calor radiativa na modelagem CFD de chamas difusivas turbulentas. O modelo e a ferramenta computacional foram desenvolvidos para simular as chamas tipo jato e tipo poça. A mistura gás-fuligem foi tratada como cinza ou não cinza, usando o modelo da soma ponderada de gases cinza (WSGG, do inglês *weighted sum of gray gases model*).

Em se tratando de radiação térmica, Biswas et al., 2007, analisaram séries temporais estocásticas pulsantes de incêndios em poças. A intensidade espectral de radiação de um incêndio em poça de etileno foi obtida através de uma série de medições. Um modelo estocástico foi desenvolvido para simular a temperatura e as espécies químicas no incêndio, tais como dióxido de carbono e fuligem.

Suo-Anttila et al., 2009, mediram o espectro de radiação térmica em incêndios em poças em regime turbulento onde testaram-se diversos combustíveis, sendo estes etanol, tolueno, JP-8 e heptano, como também se avaliou a contribuição da fuligem e de espécies gasosas sobre a emissão total de radiação. O impacto do coeficiente de absorção da radiação térmica das regiões ricas em combustível também foi avaliado. Ao final do teste de quatro combustíveis, encontraram-se diferentes características de emissão e absorção. Para as poças de etanol encontraram-se emissões dominantes provindas do vapor d'água e do dióxido de carbono enquanto para os demais combustíveis a fuligem foi a principal responsável pela emissão de radiação.

Em se tratando de modelagem de fluxo de calor radiativo, Consalvi et al., 2013, estudaram dois incêndios em poças gerados a partir de dados experimentais, usados para avaliar diferentes modelos e propriedades radiativas.

A fim de se estabelecer quais são os principais parâmetros influenciados pela variação da pressão atmosférica em incêndios em poças, Tu et al., 2013, estudaram experimentalmente o efeito da pressão atmosférica em incêndios em poças de etanol e também n-heptano, ambas com geometria retangular. Através destes experimentos concluiu-se que a taxa de queima do combustível foi proporcional à pressão do ambiente, e que a pressão afeta o coeficiente de

absorção da fuligem, assim explicando as reduções do fluxo de calor radiativo. Embora a temperatura da chama tenha aumentando levemente, a altura da chama quase não sofreu mudanças devido à pressão.

A utilização de simulação computacional em incêndios em poças tem sido amplamente empregada ao longo das últimas décadas. Wen et al., 2007, utilizaram o software FDS para simular incêndios em poças de metanol em média escala. Com essa análise se constatou que o FDS apresenta bons resultados para os parâmetros mais importantes em incêndios em poças no âmbito de segurança.

Posteriormente, Lin et al., 2010, estudaram as características do fluxo de calor radiativo em incêndios em poças. A investigação numérica se deu através da utilização do software FDS. Experimentalmente, um objeto foi colocado entre a chama e o sensor de radiação, a fim de verificar a radiação da chama contínua em comparação com a parte intermitente da chama. Os resultados mostraram que em torno de 36% do fluxo de calor radiativo é emitido pela parte intermitente da chama quando o ponto em que a medida é feita localiza-se na altura referente à base da chama. Movendo este ponto para cima, os fluxos de calor radiativo da parte intermitente da chama aumentaram gradativamente até 50%.

Ainda dentro do campo de simulação computacional de incêndios em poças, Wang et al., 2013, e Sun et al., 2014, utilizaram o software FLUENT® para simular a radiação térmica em grandes tanques com petróleo bruto expostos a incêndios em poças. Sabendo que o fluxo de calor radiativo da chama é a principal razão da propagação do fogo entre tanques de combustível, se faz necessário estabelecer a correta relação de distância entre os tanques a fim de se obter maior segurança na armazenagem do combustível. No primeiro estudo, os experimentos feitos utilizaram petróleo bruto, e no segundo experimento utilizou-se GNL (gás natural liquefeito). No primeiro caso, os resultados mostraram que a intensidade de radiação é menor perto do solo em comparação com as partes superiores, próximas à boca do tanque. Concomitantemente, nos dois casos, a intensidade de radiação diminuiu gradativamente conforme a distância radial do centro da chama aumentou, uma redução de aproximadamente 50% a cada 250 m de distância do centro da chama no primeiro caso, enquanto no segundo caso essa redução foi ainda maior.

Em se tratando da utilização do etanol, pesquisas relacionadas a este combustível estão ganhando atenção, possivelmente pelo fato de ser um biocombustível e sua utilização ter aumentado drasticamente em motores de combustão interna. Incêndios em poças de etanol ainda precisam ser mais estudados, pois lá poucos dados experimentais sobre os riscos da radiação térmica emitida e taxa de queima. Sjöström et al., 2015, estudaram grandes incêndios em poças de etanol, utilizando duas poças de 254 m², uma formada por 97% etanol e 3%

gasolina e outra por 85% etanol e 15% gasolina. Os resultados desse experimento demonstraram um comportamento oposto quando comparados a incêndios em pequenas escalas. Além disso, observou-se que o fluxo de calor radiativo de incêndios de combustíveis ricos em etanol é muito maior do que para incêndios de combustíveis com gasolina pura, para a mesma área da poça de combustível.

Quando dois ou mais incêndios em poças estão suficientemente próximos, eles passam a se influenciar, resultando em uma combinação dos incêndios. Vasanth et al., 2017, simularam múltiplos incêndios em poças envolvendo dois combustíveis diferentes. Os resultados mostraram que os incêndios de cada uma das poças podem influenciar na temperatura da chama, produção de fuligem e radiação térmica dos incêndios das demais poças.

Wang et al., 2017, utilizaram o FDS para realizar simulações computacionais com o objetivo de se obter novas correlações para a extensão horizontal de chamas dentro de um compartimento. Tais correlações adimensionais poderiam então ser usadas para cálculos de fluxos de calor radiativo em grandes escalas. Assim, constatou-se que o FDS foi capaz de realizar boas previsões para as distribuições de temperatura e velocidade, bem como prever a altura de chama, gerando dados confiáveis para a formulação de novas correlações que visam analisar extensão da chama, efeitos do diâmetro da poça e taxa de perda de calor da chama.

Zhou et al., 2017, estudaram as características radiativas de incêndios em poças em pequenas escalas. A radiação térmica foi obtida experimentalmente para diferentes tipos de combustíveis com diferentes propriedades. Constataram que combustíveis quimicamente semelhantes apresentam distribuições parecidas para a radiação nos locais de medição.

Hostikka, 2008, realizou um estudo buscando estabelecer as probabilidades de risco associadas a incêndios e também desenvolver um código computacional eficiente para a solução da radiação térmica para o FDS, visando melhorar as análises dos riscos envolvendo incêndios. Este código pode ser utilizado para resolver a transferência de radiação térmica em misturas de combustíveis gasosos, partículas de fuligem e partículas de líquido. O código calcula as propriedades radiativas da mistura gás-fuligem utilizando o modelo de banda estreita denominado RadCal. Ao aplicar o código no FDS, obteve-se uma redução de 30% no tempo total de cálculo, além de prever bons resultados para os casos testados. Contudo, o cálculo da radiação térmica por esta modelagem é dependente do tamanho da poça e da taxa de queima, assim necessitando de mais estudos nos cálculos de radiação térmica.

Sikanen e Hostikka, 2016, utilizaram o FDS para simular incêndios em poças de diversos combustíveis líquidos e assim conseguir criar um modelo para estimar as taxas de liberação de calor. O modelo é aplicado nas condições de contorno do FDS e os autores reportam que o

fluxo de calor incidente na superfície das poças de combustível durante o incêndio foi o fator mais importante para a estimativa das taxas de queima, mostrando assim que a taxa de queima depende da geometria do incêndio e também das características termofísicas do combustível. Além disso, também foi concluído que a aproximação de gás cinza utilizada pelo FDS não prediz corretamente o transporte de radiação através dos líquidos sendo necessário implementar melhores modelos para transferência de calor e evaporação para melhores resultados em incêndios em poças.

1.2 Objetivos

Os principais objetivos desta pesquisa são apresentados na Seção 1.2.1 e os objetivos específicos são apresentados na Seção 1.2.2.

1.2.1 Principais objetivos

Com base nos estudos apresentados na revisão bibliográfica, podem-se observar inúmeros casos de estudos envolvendo incêndios em poças de combustível, em ambiente aberto ou em compartimentos. Esses estudos, realizados tanto numericamente quanto experimentalmente, mostram a importância de se conhecer o fluxo de calor radiativo emitido por incêndios em poças, independentemente do combustível utilizado.

Devido ao risco envolvido em testes experimentais envolvendo incêndios, uma alternativa é a simulação computacional. Diversos softwares são capazes de realizar essa simulação, porém, o FDS é um software criado especificamente para a simulação de incêndios, sendo então o software selecionado para o desenvolvimento da presente pesquisa.

Assim, o objetivo geral deste trabalho é avaliar as predições do fluxo de calor radiativo de incêndios em poças em ambiente aberto e em compartimentos, fechados e com abertura, através de simulação computacional utilizando o software FDS. Posteriormente, objetiva-se testar alterações no FDS, as quais serão implementadas no seu código fonte, objetivando melhorar as predições do fluxo de calor radiativo.

1.2.2 Objetivos específicos

Os objetivos específicos deste trabalho são:

- Construção e validação de um modelo computacional de incêndios em poças no software FDS;

- Implementação, na sub-rotina de radiação térmica do FDS, de modelos de gás cinza atualizados, assim como a verificação de suas implementações;
- Predição dos fluxos de calor radiativos para todos os modelos de gás cinza implementados, avaliando casos com e sem a presença de partículas de fuligem;
- Avaliação da predição dos fluxos de calor radiativo para os modelos de gás cinza, aplicados para diferentes cenários de incêndio, incluindo poça em ambiente aberto e poça confinada em compartimentos (fechado e com abertura).

1.3 Organização do texto

O presente trabalho é dividido em seis capítulos. No primeiro capítulo é feita a introdução sobre radiação em incêndios em poças, seguido da revisão da literatura onde estão apresentados estudos já realizados sobre o tema. Os objetivos desta dissertação também são apresentados neste capítulo.

No segundo capítulo é apresentada a modelagem matemática do problema analisado. O equacionamento é exposto a partir das equações fundamentais que regem o escoamento, seguindo até as equações mais particulares de cada fenômeno físico. O equacionamento geral de turbulência, da combustão e dos modelos de radiação térmica é abordado nesse capítulo, e também mostra-se o equacionamento específico utilizado no software e o equacionamento dos modelos de gás cinza atualizados que foram implementados no presente trabalho.

No terceiro capítulo se detalha a metodologia utilizada para as simulações computacionais. É feita uma breve explicação geral sobre o software FDS, sendo também apresentado nesse capítulo o processo de criação dos modelos do problema, incluindo suas geometrias, características dos combustíveis e condições de contorno específicas dos casos estudados. No quarto capítulo é apresentada a verificação das simulações, sendo apresentado cada parâmetro utilizado na simulação e como são abordados no software. Para a etapa de verificação os resultados obtidos com as simulações são comparados com os resultados experimentais disponíveis na literatura para o fluxo de calor radiativo, altura de chama e temperatura de chama. Neste capítulo também é apresentada a verificação dos modelos de gás cinza que foram implementados no código fonte do FDS.

No capítulo cinco todos os resultados obtidos são apresentados. Esses resultados mostram os campos de temperatura, radiação térmica e outros fatores importantes a serem observados em incêndios em poças, obtidos com diferentes abordagens do modelo de gás cinza, para cenários de incêndio em ambiente aberto e em compartimento, fechado e com

abertura. Por fim, no sexto capítulo são feitas as conclusões desta dissertação e são feitas sugestões para trabalhos futuros envolvendo radiação térmica em incêndios em poças.

2 EQUAÇÕES FUNDAMENTAIS

Neste capítulo será apresentada a formulação matemática geral que rege o problema em estudo, além das equações que são utilizadas pelo software de simulação computacional adotado. Esse equacionamento fundamenta a modelagem numérica que será apresentada no capítulo três.

2.1 Equação de Conservação de Massa

A equação da continuidade, que descreve a conservação de massa, em um escoamento sem fontes ou sorvedouros de massa, é dada por um balanço entre as taxas de massa que entram e que saem de um elemento de volume. A variação da quantidade total de massa dentro do elemento de fluido em regime transiente é representada pela Equação 2.1, dada em notação indicial ($i = 1, 2, 3$):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (2.1)$$

onde ρ é a massa específica, t é o tempo, u_i é a componente de velocidade na direção i e x_i é a coordenada espacial na direção i .

2.2 Equação da Quantidade de Movimento

A equação da quantidade de movimento é obtida através de um balanço de forças em um elemento do volume, uma aplicação da segunda lei de Newton em sua formulação para volumes de controle onde o produto da aceleração e da massa é igual a soma das forças externas atuantes no volume de controle. Comumente, a equação de quantidade de movimento é conhecida como Equação de Navier-Stokes e é dada pela Equação 2.2:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = X_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (2.2)$$

onde ρ é a massa específica, u é a componente ortogonal de velocidade na direção i, j e k , t é o tempo, X_i é a componente da força de corpo na direção i , p representa a pressão, μ é a

viscosidade dinâmica do fluido e δ_{ij} é o operador delta de Kronecker (tem valor igual a 1 quando $i = j$ e tem valor igual a 0 quando $i \neq j$).

2.3 Equação da Conservação de Energia

Em um volume de controle, a aplicação da primeira lei da termodinâmica estabelece que a taxa de energia acumulada no volume de controle seja igual à soma da taxa líquida de energia transferida pelo fluido que escoar juntamente à transferência de calor líquida por condução e também com a taxa de geração de calor interna menos o trabalho líquido transferido do volume de controle para o ambiente. Deste modo a equação da conservação de energia é dada por:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i e) \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + q''' + S_r - p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \mu \Phi \quad (2.3)$$

onde e corresponde a energia interna específica, λ é a condutividade térmica, q''' é a taxa volumétrica de geração de energia interna, S_r é a contribuição volumétrica da radiação térmica à equação da energia, ou seja, o termo fonte radiativo e Φ a função de dissipação viscosa, que é definida na Equação 2.4 a seguir:

$$\Phi = 2 \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 \quad (2.4)$$

De maneira análoga a equação da conservação de energia pode ser escrita em termos da entalpia sensível, definida pelo termo h_s , assim obtendo a Equação 2.5. A equação de energia em termos da entalpia sensível tem especial importância porque a partir dela pode-se deduzir a expressão para o divergente de velocidade, que é a forma como o código numérico utilizado neste trabalho resolve a equação de energia.

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho h_s) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h_s) \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + q''' + S_r + \left(\frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) + \mu \Phi \quad (2.5)$$

2.4 Equação da Conservação de Espécies

A equação da conservação de espécie aglomerada, que posteriormente será definida, é dada por:

$$\rho \left(\frac{\partial Z}{\partial t} + u_i \frac{\partial Z_\alpha}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_\alpha \frac{\partial Z_\alpha}{\partial x_i} \right) + m_\alpha^{\prime\prime\prime} \quad (2.6)$$

onde Z_α é a fração mássica da espécie aglomerada α , e $m_\alpha^{\prime\prime\prime}$ é o seu termo fonte químico. O conceito de espécie aglomerada e o cálculo de $m_\alpha^{\prime\prime\prime}$ serão apresentados mais adiante neste capítulo.

2.5 Modelagem de turbulência

A turbulência é o regime mais comum em escoamentos, tanto em aplicações de engenharia como também em condições naturais. No decorrer das últimas décadas, com a melhora na capacidade computacional, modelos matemáticos têm sido utilizados para simular numericamente os escoamentos turbulentos em diversas geometrias e condições, resolvendo problemas de engenharia com grande precisão, obtendo resultados muito próximos aos obtidos em experimentos.

Em se tratando de modelagem de turbulência existem três principais metodologias para a solução de problemas envolvendo escoamentos turbulentos. Estas metodologias são conhecidas como simulação numérica direta (DNS, do inglês: *Direct Numerical Simulation*), a modelagem clássica da turbulência, também conhecida como equações médias de Reynolds (RANS, do inglês: *Reynolds Averaged Navier-Stokes*), e por fim a simulação de grandes escalas (LES, do inglês: *Large Eddy Simulation*) [Wilcox, 2006; Sagaut, 2006; Lesieur et al., 2005]. Como nesta dissertação emprega-se a metodologia de grandes escalas, esta será apresentada na próxima seção, enquanto as demais metodologias podem ser encontradas na literatura.

2.5.1 Simulação de grandes escalas (LES)

A metodologia LES é uma metodologia intermediária à DNS e RANS em termos de modelagem das escalas turbulentas. Em LES, as estruturas turbulentas transportadoras de energia e quantidade de movimento são resolvidas diretamente da solução das equações

filtradas, enquanto que as menores estruturas (sub-malha) são modeladas, resultando assim em uma significativa redução do tempo computacional quando comparado à metodologia DNS. As metodologias DNS e LES são semelhantes, pois permitem a obtenção de resultados a partir das equações de Navier-Stokes. Assim sendo, a metodologia LES não exige um grande refinamento de malha como o DNS, tornando-se possível resolver escoamentos com elevados números de Reynolds devido ao processo de separação de escalas utilizado, e por isso a metodologia LES tornou-se uma das mais promissoras metodologias para solução de escoamentos turbulentos [Silva Freire et al., 2002].

A metodologia LES foi inicialmente proposta por Smagorinsky, 1963, para modelar escoamento atmosférico. Os primeiros trabalhos de LES aplicado a escoamentos em problemas de engenharia foram reportados por Deardorff, 1970, e Schumann, 1975. Inicialmente os escoamentos estudados eram caracterizados por baixas velocidades, porém com o passar do tempo e desenvolvimento de melhores computadores as aplicações de LES rapidamente cresceram. Essa grande evolução aconteceu a partir da metade da década de 1980, e principalmente na década de 1990.

Portanto, pode-se justificar a utilização da metodologia LES pelo fato desta ter uma maior precisão do que aquela obtida em simulações RANS, aliado a um tempo computacional inferior ao requerido em aplicações em DNS. Os grandes vórtices contêm a maior parte da energia e são responsáveis pela maior transferência de quantidade de movimento, e a metodologia LES calcula esses vórtices diretamente. As pequenas escalas, ditas escalas sub-malha, as quais são modeladas em LES, tendem a ser mais isotrópicas e homogêneas do que as grandes. Dessa maneira, a metodologia LES é adequada e viável para ser empregada para simular escoamentos turbulentos realistas em aplicações de engenharia [Zhiyin, 2015].

Na literatura se encontram diversos estudos empregando a metodologia LES, incluindo trabalhos que investigam parâmetros como gradiente de temperatura, composição química de gases, propagação de chamas, interação turbulência-radiação e movimento de fumaça [McGrattan et al., 1998; Wang et al., 2002; Coelho, 2012; Enayati et al., 2017; Zhang et al., 2018].

2.5.2 O Formalismo LES

As equações para simulação de grandes escalas são derivadas pela aplicação de um filtro espacial, parametrizado pela largura Δ aplicado nas equações da conservação de massa, energia e quantidade de movimento. Essa operação pode ser definida de forma generalizada entre uma variável a ser filtrada, ϕ , e a função filtro, G expressa da seguinte maneira:

$$\bar{\phi}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G(x - \xi, \Delta) \phi(x, t) d^3 \xi \quad (2.7)$$

onde x é o vetor posição, ξ é um vetor arbitrário de integração, Δ é o tamanho característico do filtro e a barra indicada a variável já filtrada. A largura Δ do filtro é definido em função do tamanho local da célula, δx , δy e δz , e é um parâmetro chave para os submodelos de viscosidade turbulenta e para as escalas de tempo das reações. Neste trabalho a largura do filtro é definida utilizando as dimensões do volume finito nas direções dos eixos coordenados expressada desta maneira, $\Delta = (\delta x \delta y \delta z)^{1/3}$. Vórtices com tamanhos maiores que os filtros são resolvidos, enquanto que os vórtices com tamanhos menores são modelados. Essa prática é conhecida como filtragem implícita [McGrattan et al., 2017a]. Nesta dissertação utiliza-se um filtro usualmente utilizado em simulações de volumes finitos em LES. Um filtro tipo caixa que é dado por:

$$G(x - \xi, \Delta) = \begin{cases} 1/\Delta^3 & \text{se } |x - \xi| \leq \Delta/2 \\ 0 & \text{se } |x - \xi| > \Delta/2 \end{cases} \quad (2.8)$$

2.5.3 Equações fundamentais filtradas

Após a aplicação do filtro nas equações fundamentais de conservação de massa e de quantidade de movimento, pode-se reescrevê-las da seguinte forma:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \bar{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \bar{u}_i + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j) = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + \bar{\rho} \bar{g}_i + \bar{f}_{d,i} + \overline{\dot{m}_b'' u_{b,i}} \quad (2.10)$$

Os termos $\bar{\rho} \bar{u}_i$ e $\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j$ não são variáveis primitivas no cálculo, sendo assim necessário um tratamento especial. É necessário decompor os termos, assim levando para problemas de fechamento. O passo seguinte é a simples aplicação do filtro de Favre, que permite separar correlações cruzadas entre ρ e outras grandezas em problemas que se pode variar a massa específica, assim a Equação 2.10 pode ser escrita da seguinte maneira.

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \tilde{u}_i + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i + \bar{f}_{d,i} + \overline{m_b} \tilde{u}_{b,i} \quad (2.11)$$

O primeiro termo é agora separado e fornece a solução para \bar{p} . Contudo, ainda é necessário calcular a correlação $\overline{u_i u_j}$. Essa correlação é incorporada no termo do tensor de tensões sub-malha, τ_{ij}^{sgs} , que é definido na Equação 2.12.

$$\tau_{ij}^{sgs} \equiv \bar{\rho} (\overline{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad (2.12)$$

Assim, substituindo a Equação 2.12 na Equação 2.11 obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \tilde{u}_i + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}^{sgs}}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i + \bar{f}_{d,i} + \overline{m_b} \tilde{u}_{b,i} \quad (2.13)$$

Assim, a Equação 2.13 é referenciada como a equação da conservação de momento na formulação LES. Todas as variáveis são primitivas ou calculadas uma vez que se encontra um fechamento adequado para as tensões de sub-malha, τ_{ij}^{sgs} [McGrattan et al., 2017a].

2.5.4 Modelo de Smagorinsky

Os modelos sub-malha, também conhecidos como modelos de turbulência, podem ser classificados em dois grupos básicos: aqueles que dependem da viscosidade turbulenta (hipótese de Boussinesq) e aqueles baseados em equações algébricas, que não dependem da viscosidade turbulenta [Silva Freire et al., 2002]. Boussinesq propôs expressar o tensor de Reynolds sub-malha em função da taxa de deformação gerada pelo campo de velocidade filtrado e da energia cinética turbulenta.

O primeiro modelo sub-malha utilizado foi o modelo de Smagorinsky, 1963, o qual baseia-se no equilíbrio local para as pequenas escalas, sendo a produção de tensões turbulentas iguais à sua dissipação. Assim, assume-se que a produção pode ser uma função da taxa de cisalhamento do campo filtrado e a dissipação é uma função das escalas de velocidade e de comprimento Silva Freire et al., 2002. Para o modelo de Smagorinsky, a viscosidade turbulenta pode ser expressa em função da taxa de deformação e da escala de comprimento. O comprimento característico é calculado em função da discretização (malha). Lilly, 1967,

determinou analiticamente o valor da constante de Smagorinsky, $C_s = 0,18$, para turbulência homogênea e isotrópica.

No FDS, o gradiente da difusão é o modelo de turbulência usado para fechar os termos de fluxo escalar e de quantidade de movimento SGS (quantidade de movimento sub-malha, do inglês: *sub-grid scale*). Necessita-se então um modelo para o coeficiente de transporte turbulento: a viscosidade ou a difusividade turbulenta. A difusividade turbulenta é obtida utilizando um número de Schmidt constante, para a difusividade de massa, ou um número de Prandtl constante, para difusividade térmica. Assim, o coeficiente de transporte mais importante é a viscosidade turbulenta, μ_t .

A viscosidade turbulenta é modelada da seguinte maneira:

$$\mu_t = \rho (C_s \Delta)^2 |S| \quad ; \quad |S| = \left(2 S_i S_{ij} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot u)^2 \right) \quad (2.14)$$

onde a constante de Smagorinsky é dada por $C_s = 0,2$, valor similar àquele determinado por Lilly, 1967, e $\Delta = (\delta x \delta y \delta z)^{\frac{1}{3}}$ é a largura do filtro LES.

2.5.5 Modelo de Deardorff

Uma variação do modelo de Deardorff, 1980, é utilizada como modelo padrão do FDS. Neste modelo a viscosidade turbulenta pode ser calculada através da Equação 2.15:

$$\mu_t = \rho C_v \Delta \sqrt{k_{sgs}} \quad ; \quad k_{sgs} = \frac{1}{2} ((\bar{u} - \hat{u})^2 + (\bar{v} - \hat{v})^2 + (\bar{w} - \hat{w})^2) \quad (2.15)$$

onde \bar{u} é o valor médio de u no centro da célula da malha (representando a velocidade filtrada LES para a escala de comprimento Δ) e \hat{u} é uma média ponderada de u sobre as células adjacentes (representando um campo de teste filtrado para a escala de comprimento 2Δ):

$$\bar{u}_{ijk} = \frac{u_{ijk} + u_{i-1,jk}}{2} \quad ; \quad \hat{u}_{ijk} = \frac{\bar{u}_{ijk}}{2} + \frac{\bar{u}_{i-1,jk} + \bar{u}_{i+1,jk}}{4} \quad (2.16)$$

onde os termos \hat{v} e \hat{w} são definidos similarmente a \hat{u} , A constante do modelo é considerada pelo valor obtido por Pope, 2000, $C_v=0,1$.

2.5.6 Medida de resolução da turbulência (MTR)

Conforme Pope, 2004, um modelo de escoamento turbulento é considerado completo quando suas equações constitutivas são independentes do escoamento. Assim, é importante avaliar que, geralmente, LES é uma metodologia incompleta. Em geral, gera-se uma malha computacional com espaçamento caracterizado por $h(x)$ e então especifica-se $\Delta(x)$ sendo localmente proporcional a $h(x)$. A escala de comprimento da resolução da turbulência $\Delta(x)$ é um parâmetro importante em LES porque define as escalas de turbulência que são resolvidas pelas equações.

Em LES o tamanho do filtro utilizado para a filtragem das equações é um parâmetro importante, pois define as escalas de vórtices que serão resolvidas diretamente, sendo que as escalas menores que o tamanho do filtro serão modeladas. Assim, Pope, 2004, introduziu um conceito simples de medida de resolução da turbulência como uma fração da energia cinética turbulenta dos vórtices resolvidos. Para a resolução da turbulência, um parâmetro, denominado de M, que quantifica a quantidade de flutuação que é de fato resolvidas, na utilização de uma malha computacional qualquer, foi introduzida. Esse conceito é baseado na solução da energia cinética turbulenta e requer a determinação da energia cinética turbulenta residual local (parcela de energia cinética dos vórtices com escala menor que Δ e a energia cinética do escoamento resolvido).

No presente trabalho, a quantidade escalar denominada de medida de resolução da turbulência (MTR, do inglês: *Measure of Turbulence Resolution*), é definida localmente como:

$$MTR(x) = \frac{\langle k_{sgs} \rangle}{\langle TKE \rangle + \langle k_{sgs} \rangle} \quad (2.17)$$

onde o termo *TKE* (do inglês: *Turbulence Kinetic Energy*) representa a energia cinética turbulenta por unidade de massa, a qual é resolvida por:

$$TKE = \frac{1}{2} (\tilde{u}_i - \langle \tilde{u}_i \rangle) (\tilde{u}_i - \langle \tilde{u}_i \rangle) \quad (2.18)$$

A energia cinética sub-malha pode ser estimada através do modelo de viscosidade turbulenta de Deardorff, 1980, através de:

$$k_{sgs} \approx \frac{1}{2} (\tilde{u}_i - \hat{u}_i)(\tilde{u}_i - \hat{u}_i) = (\mu_t / (\rho C_v \Delta))^2 \quad (2.19)$$

onde, \tilde{u}_i é a velocidade LES resolvida e \hat{u}_i é a velocidade filtrada em uma escala 2Δ onde Δ é a largura do filtro LES, assim se obtendo uma aproximação para o conceito de Pope.

O emprego da *MTR* é útil em cálculos LES, pois permite avaliar a discretização espacial utilizada em cada problema. Tanto este parâmetro de medida de resolução da turbulência (*MTR*) quanto o parâmetro *M*, variam em uma gama de valores entre 0 e 1, com 0 indicando a resolução exata das escalas de turbulência (DNS) e 1 indicando a modelagem total das escalas (RANS).

Conforme McDermott, 2011, a solução de LES requer a resolução em torno de 80% da energia cinética no campo de escoamento, assim, os valores médios da *MTR* devem ser próximos a 0,2, sendo este valor recomendado para aplicações em incêndios.

2.6 Modelo de combustão

O modelo de combustão é empregado na equação de conservação das espécies químicas para determinar a taxa de produção (ou consumo) de massa de cada espécie α por unidade de volume, \dot{m}_α''' . O modelo tipicamente utilizado no FDS é um modelo capaz de lidar com uma ampla faixa de condições de mistura e cinética química. Para condições com chamas não pré-misturadas, com cinética química rápida, o que é válido para a maioria das aplicações do FDS, o modelo se reduz a uma aproximação simples do tipo “misturado = queimado”, chamado de Conceito de Dissipação Turbulenta (EDC, do inglês: *Eddy Dissipation Concept*) [Magnussen e Hjertager, 1977]. Assim, com o modelo EDC, a taxa de consumo de massa de combustível (espécie aglomerada $\alpha = F$), é dada por:

$$\dot{m}_F''' = -\rho \frac{\min(Z_F, Z_A/s)}{\tau_{mix}} \quad (2.20)$$

onde Z_F e Z_A são as frações mássicas das espécies aglomeradas de combustível e ar, respectivamente, s é o coeficiente estequiométrico mássico do ar, a quantidade τ_{mix} é a escala

de tempo para a mistura. Esta escala de tempo é obtida por uma expressão baseada no estado local do campo do escoamento, sendo considerados os processos físicos de difusão, advecção na escala sub-malha, e aceleração por empuxo, e então se considera o mais rápido desses processos (localmente) como a escala de tempo que controla o escoamento [McGrattan et al., 2017a; McDermott et al., 2011].

O modelo de combustão também determina a taxa de liberação de calor por unidade de volume, \dot{q}''' , que constitui uma quantidade de fundamental importância em incêndios, além de contribuir no cálculo do divergente da velocidade. Uma vez determinada, \dot{m}_α''' , a taxa de liberação de calor é obtida pelo somatório das taxas de produção mássica de cada espécie multiplicada pela sua respectiva entalpia de formação.

$$\dot{q}''' = - \sum_{\alpha} \dot{m}_\alpha''' \Delta h_{f,\alpha}^0 \quad (2.21)$$

Faz-se necessário discutir a aproximação de espécies aglomeradas antes de discutir mais detalhes do modelo de combustão. Essa discussão é importante porque a aproximação de espécies aglomeradas diminui a carga computacional do sistema reativo completo, através da combinação de espécies em grupos que transportam e reagem em conjunto. Simplificadamente, a quantidade de equações de transporte que precisam ser resolvidas é reduzida, o que aumenta a velocidade de processamento do código.

2.6.1 Aproximação de espécies aglomeradas

A descrição mais básica da cinética química de um incêndio é a reação de um combustível hidrocarboneto com ar (composto por O_2 e N_2) que produz CO_2 , H_2O , CO e fuligem. Enquanto que o combustível é usualmente uma espécie gasosa única, o ar e os produtos são espécies formadas por diversos componentes sendo que o conjunto total combustível (uma espécie), ar e produtos (soma dos componentes) são frequentemente referidos como “espécies aglomeradas”. Tipicamente em problemas resolvidos no FDS, as espécies primitivas são aglomeradas em grupos reativos e a seguinte reação simplificada é considerada:



Observa-se na Equação 2.22 que as espécies aglomeradas são o combustível, o ar e os produtos. Esta aproximação é uma simplificação de variável de progresso da reação [Fox, 2003], na qual as variáveis de progresso são frações mássicas.

Assim, uma espécie aglomerada representa uma mistura de espécies gasosas que são transportadas em conjunto (ou seja, a espécie aglomerada possui um conjunto único de propriedades de transporte) e reagem em conjunto. Do ponto de vista do modelo numérico, uma espécie aglomerada pode ser tratada como uma única espécie.

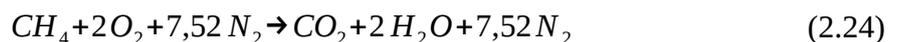
Dessa forma, no caso em que se assume uma reação de único passo, não é necessário resolver explicitamente sete equações de transporte (combustível, O₂, CO₂, H₂O, CO, N₂, fuligem). De fato, necessita-se resolver somente duas, uma para o combustível e uma para os produtos, sendo o ar tudo aquilo que não é combustível ou produtos.

2.6.2 Relação entre espécies primitivas e aglomeradas

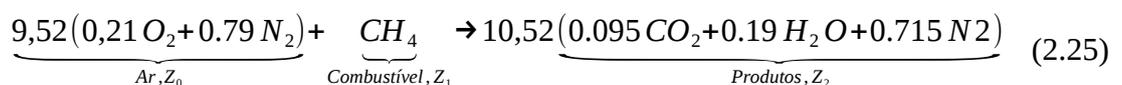
Em uma reação completa de um hidrocarboneto simples, os reagentes são o combustível, o oxigênio e o nitrogênio, e os produtos são o dióxido de carbono, vapor d'água e o nitrogênio. As frações mássicas das espécies primitivas são dadas pelo vetor composição,

$$Y = [Y_{CH_4} \ Y_{O_2} \ Y_{N_2} \ Y_{CO_2} \ Y_{H_2O}] \quad (2.23)$$

As espécies aglomeradas são grupos de espécies primitivas que existem no escoamento somente em determinadas proporções. Por exemplo, o ar pode ser considerado como uma espécie aglomerada composta por 21% de O₂ e 79% de N₂ em volume. A hipótese fundamental ao aglomerar espécies primitivas é que os novos grupos de espécies irão se transportar e reagir em grupo. Para exemplificar é dada a reação de passo único de metano a seguir:



que é equivalente a:



onde, 9,52 mols de ar reagem com 1 mol de combustível para produzir 10,52 mols de produto. Deste modo, as espécies primitivas foram agrupadas pela fração volumétrica em espécies aglomeradas e os coeficientes estequiométricos das espécies aglomeradas são o somatório dos coeficientes estequiométricos das espécies primitivas da Equação 2.24. Nota-se que os coeficientes na Equação 2.25 são aproximados e não exatamente iguais aos coeficientes da Equação 2.24, por exemplo, $9,52 \times 0,21$ é apenas um valor próximo e não igual a 2. A fim de minimizar esse problema de precisão o código FDS normaliza internamente as frações volumétricas e faz os ajustes necessários nos coeficientes estequiométricos aglomerados especificados.

As frações mássicas das espécies aglomeradas são denominadas como Z_i onde $i = 0, 1, \dots, N_z$, onde N_z é o número de espécies aglomeradas. A fração mássica Z_0 é encontrada a partir de $Z_0 = 1 - \sum_{i=1}^{N_z} Z_i$.

A transformação linear de espécie aglomerada para espécie primitiva é dada por:

$$Y = AZ \quad (2.26)$$

onde A é a matriz transformação (N_y linhas por (N_z+1) colunas) onde N_y é o número de espécies primitivas e N_z é o número de espécies aglomeradas. Cada coluna de A representa uma diferente espécie aglomerada e seus elementos são as frações mássicas de cada espécie primitiva em determinada espécie aglomerada:

$$a_{\alpha i} = \frac{v_{\alpha i} W_{\alpha}}{\sum_{\beta} v_{\beta i} W_{\beta}} \quad (2.27)$$

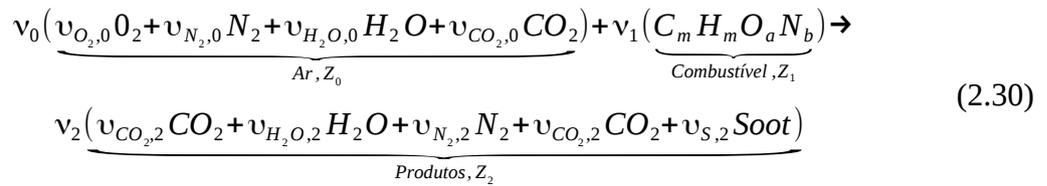
onde $v_{\alpha i}$ são as frações volumétricas das espécies primitivas α na espécie aglomerada i , e W_{α} são as massas moleculares. Exemplificando a partir da Equação 2.25, se $Z = [0,30,20,5]^T$, a transformação de espécies aglomeradas para primitivas pode ser feita da seguinte forma:

$$Y = \begin{bmatrix} Y_{O_2} \\ Y_{N_2} \\ Y_{CH_4} \\ Y_{CO_2} \\ Y_{H_2O} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,2330 & 0 & 0 \\ 0,7670 & 0 & 0,7248 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0,1514 \\ 0 & 0 & 0,1238 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0,3 \\ 0,2 \\ 0,5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,0699 \\ 0,5925 \\ 0,2000 \\ 0,0757 \\ 0,0619 \end{bmatrix} \quad (2.28)$$

Para transformar de volta para espécies aglomeradas a partir de espécies primitivas, emprega-se:

$$Z = BY \quad ; \quad B = (A^T A)^{-1} A^T \quad (2.29)$$

Em se tratando de hidrocarbonetos a equação de reação química no FDS é definida como:



como pode ser visto na Equação 2.30 a fração volumétrica da espécie primitiva α na espécie aglomerada i é representada por $v_{\alpha i}$, e os coeficientes estequiométricos para cada espécie aglomerada i é representado por v_i .

As quantidades de monóxido de carbono e de fuligem, similarmente, são calculadas através da relação entre a massa da espécie produzida pela massa de combustível que reage da seguinte forma:

$$y_{CO_2} = \frac{\text{massa de CO nos produtos}}{\text{massa de combustível que reage}} \quad (2.31)$$

nesse sistema a espécie aglomerada 0 é o ar, o combustível é a espécie aglomerada 1 e os produtos são a espécie aglomerada 2. Os coeficientes estequiométricos do monóxido de carbono (subscrito CO) e da fuligem (subscrito S) dentro da espécie aglomerada produtos são encontrados pelo FDS utilizando as seguintes relações:

$$v_2 v_{CO,2} = -v_1 \frac{W_1}{W_{CO}} y_{CO} \quad (2.32)$$

$$v_2 v_{S,2} = -v_1 \frac{W_1}{W_S} y_S \quad (2.33)$$

respectivamente, e os demais coeficientes são obtidos através de um balanço atômico.

2.7 Modelagem da radiação térmica

Como apresentado em Howell et al., 2016, apresenta a energia emitida de um objeto para outro pode ser analisada sob a seguinte perspectiva. A fonte da radiação emitida é uma combinação de oscilações e transições eletrônicas e moleculares, bem como vibrações de rede. Uma vez que a energia radiante é emitida, ela se propaga como uma onda eletromagnética sendo independente de se ter vácuo ou matéria ao longo do caminho. De maneira simplificada, a transferência de calor por radiação pode ser descrita como sendo a transferência de energia através da propagação de ondas eletromagnéticas [Incropera et al., 2007; Çengel e Ghajar, 2012].

Um exemplo de transferência de calor por radiação é aquela emitida pelo Sol, a qual entra na atmosfera da Terra, onde é parcialmente absorvida e espalhada. Uma parte significativa da radiação do Sol atinge a superfície da Terra, e novamente, parcialmente é absorvida e parcialmente espalhada como representado na Figura 2.1. Nesse exemplo três diferentes mecanismos físicos podem ser observados: emissão, absorção e espalhamento. Esses mecanismos possuem natureza espectral, isto é, todos dependem do comprimento de onda ou frequência da onda eletromagnética.



Figura 2.1 - Efeitos atmosféricos da radiação solar [adaptado de Siegel e Howell, 2016].

A radiação de ondas eletromagnéticas também pode ser classificada de acordo com seu comprimento de onda no vácuo ou sua frequência. O número de onda também pode ser considerado para representar os efeitos espectrais. Quando a radiação se propaga de um meio para outro, o seu comprimento de onda pode mudar, sendo uma função do índice de refração.

Porém, a frequência das oscilações continua constante entre os diferentes meios e por isso se utiliza a frequência para descrever o comportamento espectral da onda.

O intervalo de ondas eletromagnéticas pode ser observado na Figura 2.2. Analisando a figura nota-se que as ondas de rádio e televisão podem possuir comprimentos de onda da ordem de milhares de metros, apresentando a maior faixa de tamanho entre as ondas eletromagnéticas. Em contrapartida, as ondas de raios cósmicos podem possuir comprimento de onda muito pequeno. Dentro dessa gama de valores que abrange mais de 18 ordens de grandeza, a luz visível é confinada na faixa de 0,4-0,7 μm . Para a maioria dos casos práticos, a radiação térmica possui um comprimento de onda dentro de uma faixa de 10 μm a 100 μm .

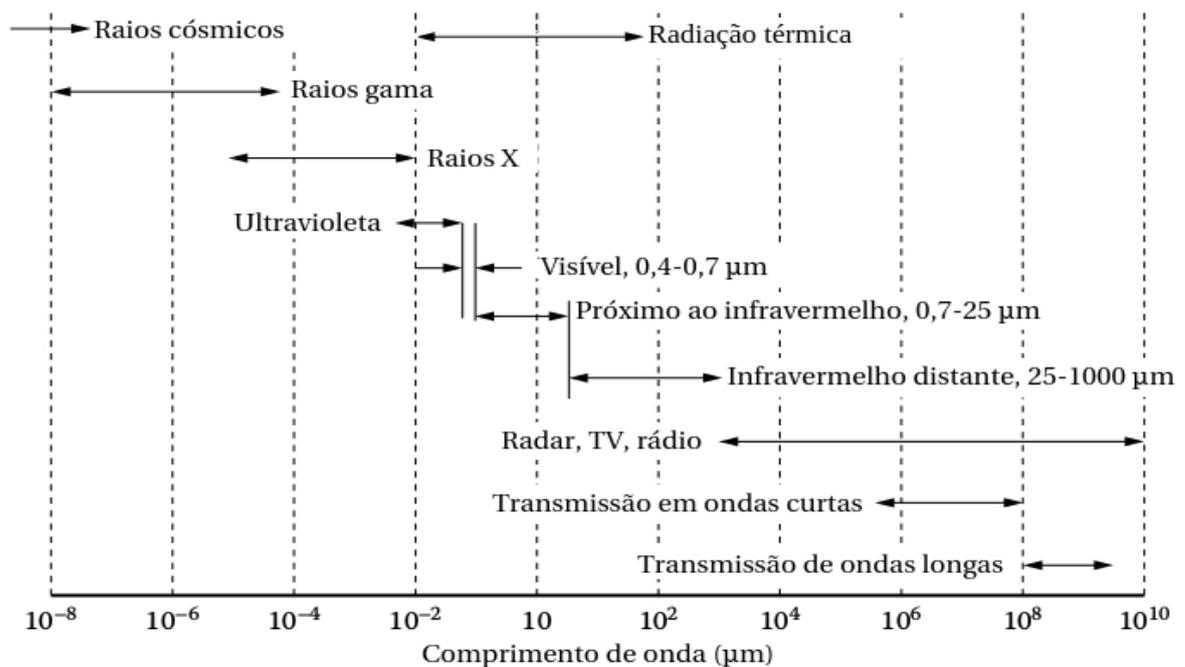


Figura 2.2 - Espectro da radiação de ondas eletromagnéticas (comprimento de onda no vácuo) [adaptado de Siegel e Howell, 2016].

2.7.1 Corpo negro

O conceito de corpo negro é básico para o estudo de transferência de energia radiativa. Um corpo negro é uma idealização, pois permite que se absorva toda a radiação incidente (sem nenhuma fração de energia sendo refletida e sem energia transmitida pelo corpo) e ele serve como padrão em caso de comparação com materiais reais, já que estes materiais nunca absorvem toda a energia em todos os comprimentos de onda. Esse conceito de corpo negro se

aplica para todos os comprimentos de onda e para todos os ângulos de incidência [Siegel e Howell, 2016].

Algumas características do corpo negro se destacam devido a sua importância. Dentre essas, o corpo negro absorve toda a energia radiante que nele incide, independente do comprimento de onda e da direção. Outra característica é que para certa temperatura e certo comprimento de onda, nada emite mais energia radiativa que o corpo negro. Ainda, o corpo negro pode ser considerado um emissor difuso, isto é, a radiação por ele emitida apenas depende da temperatura e não da direção.

A distribuição espectral de Planck do poder emissivo e da intensidade de radiação são dadas pela Equação 2.34:

$$E_{\lambda b}(T) = \pi I_{\lambda b}(T) = \frac{2\pi h c_0^2}{n^2 \lambda^5 \left[\exp\left(\frac{h c_0}{n k_B \lambda T}\right) \right] - 1} = \frac{2\pi C_1}{n^2 \lambda^5 \left[\exp\left(\frac{C_2}{n \lambda T}\right) \right] - 1} \quad (2.34)$$

onde, λ é o comprimento de onda no meio de índice de refração n . A função distribuição de corpo negro de Planck é expressa em termos de duas constantes universais: constante de Planck, $h = 6,62606957 \times 10^{-34}$ J·s e constante de Boltzmann, $k_B = 1,3806488 \times 10^{-23}$ J/K. Também são utilizadas duas constantes auxiliares de radiação que são definidas como $C_1 = h c_0^2$ e $C_2 = h c_0 / k_B$ que equivalem respectivamente a $0,59552137 \times 10^8$ W $\mu\text{m}^4/(\text{m}^2 \cdot \text{sr})$ e $1,4387752 \times 10^4$ $\mu\text{m} \cdot \text{K}$ e o valor da constante $c_0 = 2,9979 \times 10^8$ m·s⁻¹, sendo esta a velocidade da luz no vácuo.

A partir da integração espectral da Equação 2.32 pode-se obter uma equação para o fluxo de energia emitida pelo corpo negro, em W/m². Essa equação é conhecida como Lei de Stefan-Boltzmann e é apresentada na Equação 2.33, onde $\sigma = 5,6704 \times 10^{-8}$ W/(m²·K⁴) é a constante de Stefan-Boltzmann.

$$E_b = \sigma T^4 \quad (2.35)$$

2.7.2 Intensidade de radiação

A radiação transportada em qualquer direção é definida em termos de intensidade. Existem duas definições de intensidade, conforme a sua dependência espectral: a intensidade espectral, que se refere à radiação em um intervalo $d\lambda$ no entorno de um comprimento de onda

λ , e a intensidade total, que se refere a radiação integrada, incluindo todos os comprimentos de onda [Siegel e Howell, 2016]. A intensidade espectral de um corpo negro pode ser escrita como $I_{\lambda b}(\lambda)$, onde o índice subscrito λ denota a quantidade espectral que está sendo considerada. A intensidade espectral emitida é definida como a energia emitida por unidade de tempo, por unidade de intervalo de comprimento de onda no entorno do comprimento de onda λ , por unidade de área de superfície projetada elementar normal a direção (θ, φ) , e em um ângulo sólido elementar unitário centrado em torno da direção (θ, φ) como pode ser visto na Figura 2.3.

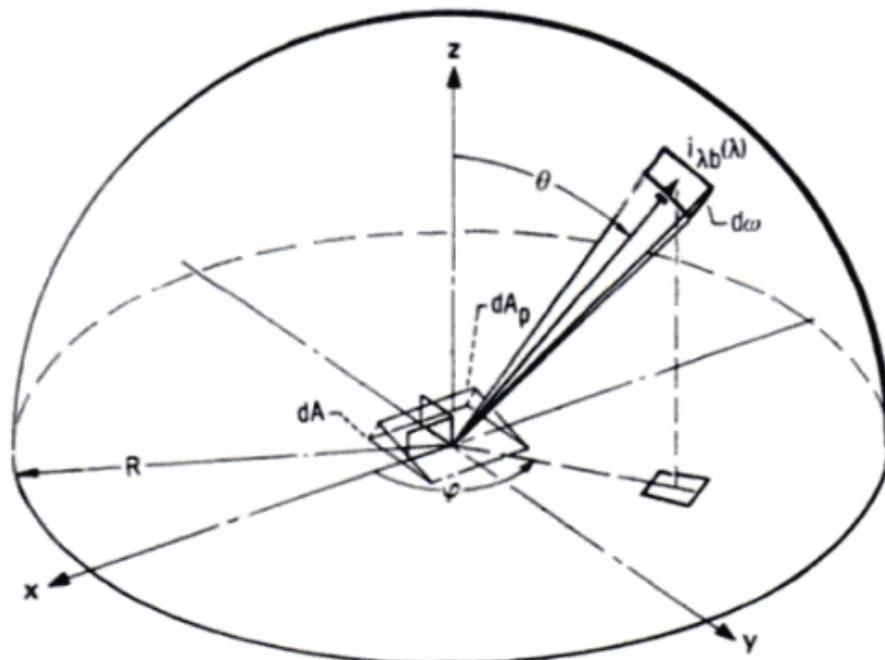


Figura 2.3 - Intensidade de emissão espectral de uma superfície negra [adaptado de Siegel e Howell, 2002].

A intensidade de radiação independe da direção. A intensidade total I_b é definida analogamente a $I_{\lambda b}(\lambda)$, exceto que esta inclui a radiação para todos os comprimentos de onda. A intensidade total consiste na integração da intensidade espectral em todos os comprimentos de onda.

$$I_b = \int_{\lambda=0}^{\infty} I_{\lambda b}(\lambda) d\lambda \quad (2.36)$$

2.7.3 Equação da transferência radiativa (RTE)

A equação da transferência radiativa (RTE, do inglês: *Radiative Transfer Equation*) é uma relação fundamental da transferência de calor radiativo. Essa relação é caracterizada por ser uma relação de conservação entre o aumento devido à emissão mais o aumento devido ao espalhamento, menos a redução pela absorção e a redução pelo espalhamento, em todas as direções. Essa relação pode ser expressa matematicamente como:

$$I_{\lambda}(S+dS, \Omega, t+dt) - I_{\lambda}(S, \Omega, t) = \kappa_{\lambda} I_{\lambda,b}(S, t) dS - \kappa_{\lambda} I_{\lambda}(S, \Omega, t) dS - \sigma_{s,\lambda} I_{\lambda}(S, \Omega, t) dS + \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_i=4\pi} \sigma_{s,\lambda} I_{\lambda}(S, \Omega_i, t) \phi_{\lambda}(\phi_i, \phi) d\phi_i dS \quad (2.37)$$

No FDS a condução e a radiação térmica dos gases são representadas pelo divergente do vetor do fluxo de calor na equação de energia. A RTE para meios que absorvem, emitem e espalham a radiação térmica é descrita da seguinte forma [Viskanta, 1987]:

$$s \cdot \nabla I_{\lambda}(x, s) = \underbrace{-\kappa(x, \lambda) I_{\lambda}(x, s)}_{\text{Energia perdida pela absorção}} - \underbrace{\sigma_s(x, \lambda) I_{\lambda}(x, s)}_{\text{Energia perdida pelo espalhamento}} + \underbrace{B(x, \lambda)}_{\text{Termofonte de emissão}} + \underbrace{\frac{\sigma_s(x, \lambda)}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(s', s) I_{\lambda}(x, s') ds'}_{\text{Termo de espalhamento}} \quad (2.38)$$

onde $I_{\lambda}(x, s)$ é a intensidade de radiação para o comprimento de onda específico, λ , s é o vetor direção da intensidade, $\kappa(x, \lambda)$ e $\sigma_s(x, \lambda)$ são os coeficientes locais de absorção e espalhamento. $B(x, \lambda)$ é o termo fonte de emissão.

Para as simulações, a dependência espectral da RTE não pode ser resolvida precisamente. Ao invés disso, o espectro da radiação é dividido em um número de bandas e para cada banda uma RTE é resolvida. Por exemplo, a RTE específica para uma banda para um gás sem espalhamento, como serão os casos estudados no presente trabalho, é:

$$s \cdot \nabla I_n(x, s) = B_n(x) - \kappa_n(x) I_n(x, s), n=1 \dots N \quad (2.39)$$

onde I_n é a intensidade de radiação integrada em toda a banda n , e κ_n é o coeficiente de absorção médio apropriado para cada banda. Quando as intensidades correspondentes para as bandas são conhecidas, a intensidade total é calculada pelo somatório de todas as bandas:

$$I(x, s) = \sum_{n=1}^N I_n(x, s) \quad (2.40)$$

2.7.4 Termo fonte de emissão

O termo fonte de emissão para cada banda n é dado por:

$$B_n(x) = \kappa_n(x) I_{b,n}(x) \quad (2.41)$$

onde $I_{b,n}$ é a fração de radiação de corpo negro na banda n definida entre (λ_{\min} e λ_{\max}), na temperatura local $T(x)$:

$$I_{b,n}(x) = F_n(\lambda_{\min}, \lambda_{\max}) \sigma T(x)^4 / \pi \quad (2.42)$$

Mesmo com um pequeno número de bandas, resolver múltiplas RTEs consome bastante tempo computacional. Assim, uma alternativa é o emprego de uma única banda, empregando o modelo de gás cinza. Esta foi a alternativa escolhida no presente trabalho. No modelo de gás cinza para a modelagem do coeficiente de absorção da mistura gás-fuligem, a dependência espectral é aglomerada em um único coeficiente de absorção ($N=1$) e o termo fonte é dado pela intensidade de radiação de corpo negro:

$$I_b(x) = \frac{\sigma T(x)^4}{\pi} \quad (2.43)$$

O modelo de gás cinza é o modelo padrão do FDS. Para chamas opticamente finas, onde a carga de fuligem é pequena em relação à carga de dióxido de carbono e vapor de água, a hipótese de gás cinza pode superestimar a radiação emitida. A avaliação de diferentes modelos de gás cinza para a modelagem do coeficiente de absorção presente nos termos de emissão e absorção da RTE constitui o principal objetivo do presente estudo.

2.7.5 Contribuição da radiação na equação da energia

O vetor fluxo de calor radiativo \dot{q}_r'' é definido como:

$$\dot{q}_r''(x) = \int_{4\pi} s' I(x, s') ds' \quad (2.44)$$

A contribuição da fase gás para o termo de perda radiativa na equação da energia é dada pelo divergente do fluxo de calor radiante, apresentado na Equação 2.45 já para o modelo de gás cinza:

2.7.6 Discretização angular (discretização do ângulo sólido)

O ângulo sólido pode ser definido como a relação entre a área projetada e o quadrado do comprimento da corda, desde o ápice até a área. Deve-se considerar uma área de superfície elementar dA inserida em um hemisfério de raio R , como representado na Figura 2.4. Por definição, um ângulo sólido em qualquer lugar acima de dA é igual à área interceptada no hemisfério. Como também pode ser observado na Figura 2.4, um elemento desta área do hemisfério é dado por $\sin \theta d\theta d\phi$ resultando assim na Equação 2.45:

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi \quad (2.45)$$

A integral da Equação 2.45 em todos os ângulos que circulam o campo do hemisfério tem valor de 4π sr conforme mostrado na Equação 2.46.

$$\int_{4\pi} d\Omega = \int_{\theta=0}^{\pi/2} \int_{\phi=0}^{2\pi} \sin \theta d\theta d\phi = 4\pi \quad (2.46)$$

Esse mesmo equacionamento é aplicado na rotina computacional do software FDS e obedece ao seguinte equacionamento mostrado por McGrattan et al., 2017a. Do mesmo modo que o mostrado na Figura 2.4 a discretização angular é feita iniciando pela divisão do ângulo polar, θ , em N_θ bandas, onde N_θ é um inteiro par. Cada banda θ é dividida em $N_\phi(\theta)$ partes na direção azimutal, Φ . $N_\phi(\theta)$ também deve ser divisível por 4. Os números de N_θ e $N_\phi(\theta)$ são escolhidos para fornecer o total de ângulos discretos $N\Omega$ o mais próximo possível do valor definido pelo usuário, e é calculado como:

$$N\Omega = \sum_{i=1}^{N_\theta} N_\phi(\theta_i) \quad (2.47)$$

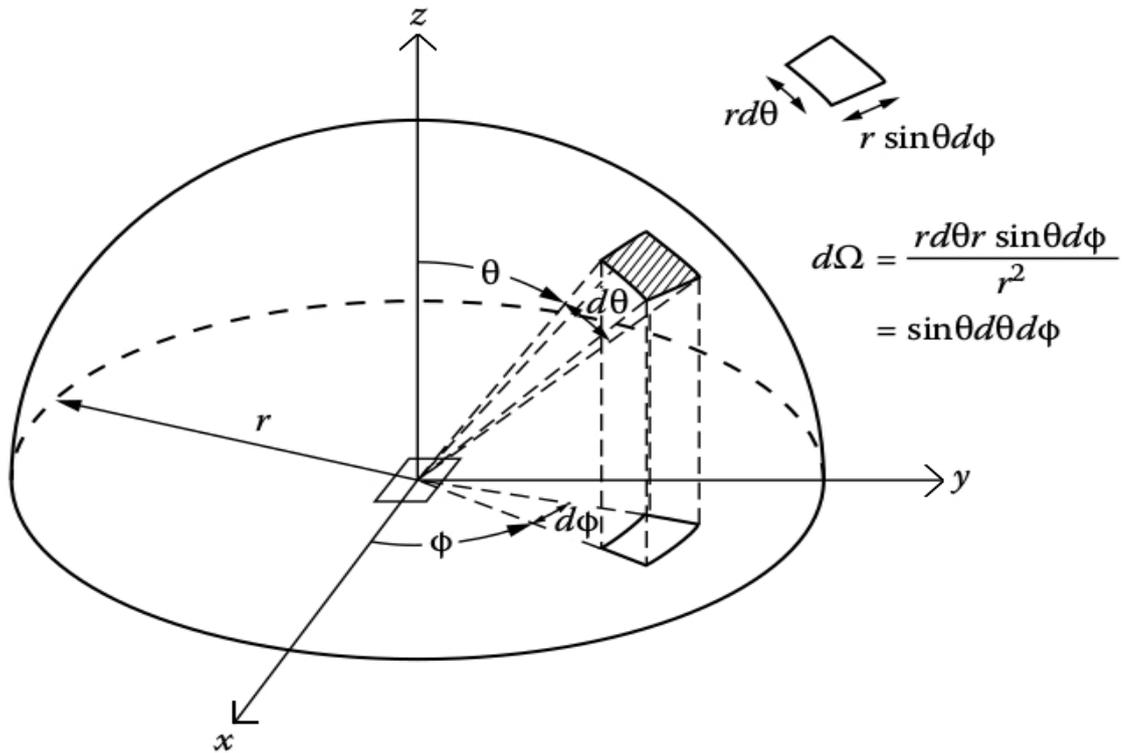


Figura 2.4 - Hemisfério que caracteriza as relações de ângulos sólidos, a fim de definição [adaptado de Siegel e Howell, 2016].

Essa distribuição se baseia em regras empíricas que tentam produzir ângulos sólidos iguais $\delta\Omega' = 4\pi/N_\Omega$, e sendo assim o número de bandas θ é dado por:

$$N_\theta = 1,17 N_\Omega^{1/2,26} \quad (2.48)$$

sendo arredondado para o número inteiro mais próximo. O número de ângulos Φ em cada banda é:

$$N_\phi(\theta) = \max\{4, 0.5N_\Omega[\cos(\theta^-) - \cos(\theta^+)]\} \quad (2.49)$$

sendo arredondado para o inteiro mais próximo divisível por 4. θ^- e θ^+ são respectivamente os limites inferior e superior da banda θ .

2.7.7 Discretização espacial

No software FDS, a malha utilizada para resolver a RTE é a mesma utilizada para resolver as equações hidrodinâmicas. A RTE é resolvida usando técnicas similares àquelas empregadas na solução do transporte convectivo através de métodos de volume finitos para escoamentos. Detalhes desse método podem ser encontrados em Raithby e Chui, 1990; Hostikka, 2008.

O espectro de radiação térmica é primeiramente dividido em bandas, e para um gás cinza o procedimento é aplicado na única banda existente. A esfera é então discretizada, como mostrado na seção anterior, em um número de ângulos de controle definidos. O domínio computacional é dividido em sua respectiva malha numérica de volumes finitos, sendo a RTE integrada tanto para cada célula como para cada direção, sobre o volume da célula e também sobre o ângulo de controle correspondente.

De acordo com McGrattan et al., 2017a, o FDS assume que a intensidade de radiação é constante para cada face da célula, cada volume de controle e em todas as direções angulares. A integral da superfície pode ser aproximada pela soma das faces das células. Assume-se também que o coeficiente de absorção e a intensidade de corpo negro sejam constantes para cada volume de controle, assim se obtém:

$$\sum_{m=1}^6 A_m I_m^l D_m^l = \kappa_{ijk} [I_{b,ijk} - I_{ijk}^l] V_{ijk} \delta \Omega^l \quad (2.50)$$

onde I_{ijk}^l é a intensidade de radiação na direção l , I_m^l é a intensidade de radiação na face da célula m , $I_{b,ijk}$ é a intensidade de radiação do corpo negro na célula, $\delta \Omega^l$ corresponde ao ângulo sólido discreto na direção l , V_{ijk} representa o volume da célula ijk , A_m é a área da célula m . D_m^l representa a integração dos vetores normais ao sistema de coordenadas em todos os ângulos sólidos discretos não dependentes da coordenada física, apenas da direção e é calculado por:

$$D_m^l = \int_{\Omega^l} (\mathbf{s}' \cdot \mathbf{n}_m) ds' \quad (2.51)$$

onde \mathbf{n}_m é o vetor unitário normal à face da célula m .

A intensidade na face da célula, I_m^l é calculada utilizando um esquema *upwind* de primeira ordem. Por exemplo, considerando um ângulo de controle que corresponde ao vetor \mathbf{s} , se a radiação viajando na direção positiva x , então, $\mathbf{s} \cdot \mathbf{i} \geq 0$, a intensidade na face a montante, I_{xu}^l é igual ao valor na face vizinha é, $I_{l-1,ijk}^l$, e que a intensidade na face jusante I_{ijk}^l é igual ao

valor da intensidade na própria célula. Assim, a Equação 2.50 pode ser escrita utilizando as intensidades a jusante I_{xu}^l , I_{yu}^l , I_{zu}^l e I_{ijk}^l :

$$\begin{aligned} & A_x I_{xu}^l D_{xu}^l + A_x I_{ijk}^l D_{xd}^l + \\ & A_y I_{yu}^l D_{yu}^l + A_y I_{ijk}^l D_{yd}^l + \\ & A_z I_{zu}^l D_{zu}^l + A_z I_{ijk}^l D_{zd}^l = \kappa_{ijk} I_{b,ijk} V_{ijk} \delta\Omega^l - \kappa_{ijk} I_{ijk}^l V_{ijk} \delta\Omega^l \end{aligned} \quad (2.52)$$

onde os termos D são as integrais mostradas na Equação 2.51 calculados a montante e a jusante dos lados da célula. Em malhas retilíneas, $D_{xu}^l = -D_{xd}^l$, a equação pode ser mais simplificada. As integrais, D , nos ângulos sólidos podem ser calculadas analiticamente por:

$$D_x^l = \frac{1}{2} (\text{sen } \phi^{+1} - \text{sen } \phi^{-1}) [\Delta \theta - (\cos \theta^+ \text{sen } \theta^+ - \cos \theta^- \text{sen } \theta^-)] \quad (2.53)$$

$$D_y^l = \frac{1}{2} (\cos \phi^{-1} - \cos \phi^+) [\Delta \theta - (\cos \theta^{+1} \text{sen } \theta^{+1} - \cos \theta^{-1} \text{sen } \theta^-)] \quad (2.54)$$

$$D_z^l = \frac{1}{2} \Delta \phi [(\text{sen } \theta^+)^2 - (\text{sen } \theta^-)^2] \quad (2.55)$$

$$\delta\Omega^l = \int_{\Omega^l} d\Omega = \int_{\delta\phi} \int_{\delta\theta} \text{sen } \theta d\theta d\phi \quad (2.56)$$

e a Equação 2.52 para intensidades desconhecidas, I_{ijk}^l , é escrita da seguinte forma:

$$a_{ijk}^l I_{ijk}^l = a_x^l I_{xu}^l + a_y^l I_{yu}^l + a_z^l I_{zu}^l + b_{ijk}^l \quad (2.57)$$

onde

$$a_{ijk}^l = A_x |D_x^l| + A_y |D_y^l| + A_z |D_z^l| + \kappa_{ijk} V_{ijk} \delta\Omega^l \quad (2.58)$$

$$a_x^l = A_x |D_x^l| \quad (2.59)$$

$$a_y^l = A_y |D_y^l| \quad (2.60)$$

$$a_z^l = A_z |D_z^l| \quad (2.61)$$

$$b_{ijk}^l = \kappa_{ijk} I_{b,ijk} V_{ijk} \delta \Omega^l \quad (2.62)$$

onde \mathbf{i} , \mathbf{j} e \mathbf{k} são os vetores do plano cartesiano do sistema de coordenadas. θ^+ , θ^- , φ^+ e φ^- são os limites superiores e inferiores dos ângulos de controle nas direções polar e azimutal e $\Delta\theta = \theta^+ - \theta^-$ e $\Delta\varphi = \varphi^+ - \varphi^-$.

O método de solução da Equação 2.52 é baseado na sequência de Kim e Huh, 1999, onde o sentido da solução do problema depende do sentido de propagação da intensidade de radiação. Fazendo a marcha no sentido jusante, as intensidades a montante nas três direções são conhecidas, e a intensidade I_{ijk}^l pode ser resolvida diretamente pela equação matemática. No primeiro volume a ser resolvido todas as intensidades a montante são determinadas a partir das condições de contorno. A solução desse sistema de equação seria iterativa na existência de reflexão, espalhamento ou um cenário opticamente muito espesso, no entanto no software FDS não são realizadas iterações [McGrattan et al., 2017a].

2.7.8 Condições de contorno da radiação

A condição de contorno para a intensidade de radiação deixando uma parede difusa cinza é dada por:

$$I_w^l = \frac{\varepsilon \sigma T_w^4}{\pi} + \frac{1-\varepsilon}{\pi} \int_{s' \cdot n_w = 0} I_w(s') |s' \cdot n_w| ds' \quad (2.63)$$

onde $I_w(s)$ é a intensidade na parede, ε é a emissividade na parede, e T_w é a temperatura na superfície da parede. Empregando o método de volumes finitos, a discretização da condição de contorno para paredes sólidas é dada por:

$$I_w^l = \frac{\varepsilon \sigma T_w^4}{\pi} + \frac{1-\varepsilon}{\pi} \sum_{D^{l'} < 0} I_w^{l'} |D_w^{l'}| \quad (2.64)$$

onde $D_w^{l'} = \int_{\Omega^{l'}} (s \cdot n_w) d\Omega$. A limitação $D_w^{l'} < 0$ significa que apenas as direções de “chegada” são computadas quando existe calculo de reflexão. O fluxo de calor radiativo líquido na parede é:

$$\dot{q}_r'' = \sum_{l=1}^{N_\Omega} I_w^l \int_{\delta\Omega} (s' \cdot n_w) ds' = \sum_{l=1}^{N_\Omega} I_w^l D_n^l \quad (2.65)$$

onde o coeficiente D_n^l é igual a $\pm D_x^l$, $\pm D_y^l$ ou $\pm D_z^l$ e são calculados para cada elementos da parede no início do cálculo.

As condições de contorno do tipo aberta são tratadas como paredes negras, onde a intensidade recebida é a intensidade do corpo negro à temperatura ambiente do exterior do domínio.

2.7.9 Formação e efeitos da fuligem

A formação de fuligem é um fenômeno frequentemente observado na combustão de hidrocarbonetos e envolve processos químicos e físicos. A formação da fuligem pode ser vista através de três diferentes subprocessos principais: nucleação, aglomeração e coagulação das partículas de fuligem [Law, 2006]. As características espectrais da fuligem são importantes e devem ser contabilizadas no cálculo da transferência de calor por radiação no meio participante.

Neste trabalho o modelo de propriedades espectrais da fuligem utilizado é o RADCAL, que é o modelo padrão do FDS para o cálculo da radiação térmica, utilizando um espectro contínuo para a fuligem onde os seus valores são calculados separadamente para regiões acima ou abaixo dos limites para as bandas dos gases. Este modelo é baseado nos estudos de Dalzell e Sarofim, 1969.

O principal objetivo ao utilizar os campos de fuligem no presente trabalho é analisar a contribuição da fuligem na transferência de calor radiativo de um incêndio em poça. Como já estudado por Centeno et al., 2016, espera-se um aumento no fluxo de calor radiativo em regiões com maiores concentrações de fuligem indicando que altas concentrações de fuligem podem intensificar a transferência de calor. No entanto, em se tratando de perfis de temperatura os autores observaram uma pequena redução das temperaturas, exceto em regiões com altas concentrações de fuligem. Assim, nesta dissertação espera-se encontrar resultados similares, com aumento nos valores do fluxo de calor radiativo e uma redução na temperatura para os casos em que se considera a fuligem.

2.8 Modelagem do coeficiente de absorção

O meio participante pode ser composto por moléculas, átomos, íons e elétrons livres, que podem assumir diferentes níveis de energia. Em uma molécula, os átomos formam um sistema dinâmico com modos vibracionais e rotacionais que possuem níveis de energia específicos. Quando ocorre emissão de energia radiativa, fótons são liberados, enquanto na absorção de energia, eles são capturados. Assim, quando um fóton é emitido ou absorvido, a energia da partícula emissora ou absorvedora é reduzida ou aumentada, respectivamente. Como determinada frequência (ou número de onda) está associada com a transição de um nível de energia para outro, na ausência de outros efeitos, o espectro da radiação é composto por linhas espectrais de espessura infinitesimal posicionadas naquela frequência. Entretanto, estas linhas possuem largura espectral finita, resultante de vários efeitos de alargamento (natural, Doppler, por colisão e Stark, sendo o alargamento por colisão o mais importante para condições de engenharia envolvendo radiação no infravermelho). Devido a estes motivos, as propriedades radiativas dos gases exibem forte dependência espectral, conforme ilustrado na Figura 2.5, onde está apresentado o espectro do coeficiente de absorção em função do número de onda (variável espectral), para o vapor d'água na temperatura de 2000 K e à pressão parcial de 0,1 atm. Cabe salientar que o espectro mostrado naquela figura é alterado conforme a composição do meio e o seu estado termodinâmico, além da posição no espectro.

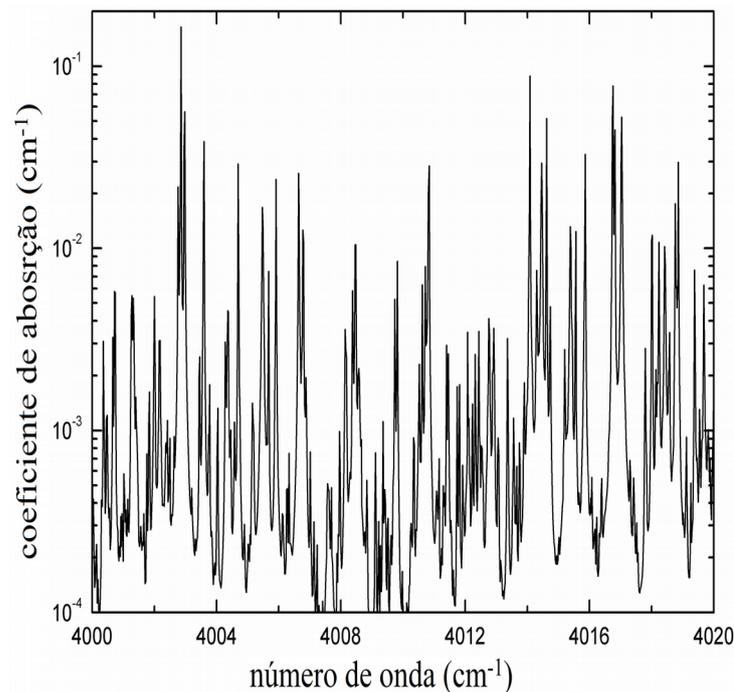


Figura 2.5 - Espectro do coeficiente de absorção de H_2O para $T = 2000 \text{ K}$ e $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,1 \text{ atm}$ [adaptado de Mossi et al., 2012].

A solução da RTE exige o conhecimento do comportamento espectral do coeficiente de absorção. A forma mais precisa de considerar tal comportamento é através do modelo linha-por-linha (LBL, do inglês: *line-by-line*), no qual a RTE é resolvida em todos os números de onda em que o coeficiente de absorção é fornecido; outra forma é através da aplicação de modelos espectrais. O modelo LBL fornece resultados de elevada precisão, porém esses cálculos exigem muito esforço computacional, inviabilizando por ora a sua aplicação acoplada para solução da maioria dos problemas reais de engenharia. Outro ponto a ser observado diz respeito às não-uniformidades nas distribuições de temperatura e concentração das espécies químicas, as quais afetam o coeficiente de absorção espectral das misturas. Assim, vários modelos espectrais de gases reais têm sido e continuam sendo desenvolvidos. Os modelos espectrais simplificam o problema da quantidade de informações espectrais e reduzem consideravelmente o tempo computacional. Para meios onde o espalhamento é desconsiderado a RTE utilizada é dada por:

$$\frac{\partial I_{\eta}}{\partial S} = -\kappa_{\eta}(S)I_{\eta}(S) + \kappa_{\eta}(S)I_{CN,\eta}(S) \quad (2.66)$$

Nesse contexto, o modelo de gás cinza é um modelo que busca simplificar e reduzir consideravelmente o tempo computacional na solução espectral da RTE. Neste modelo considera-se que o valor do coeficiente de absorção κ é independente da variável espectral (frequência, número de onda, ou comprimento de onda), podendo assumir um valor constante ou, de maneira mais elegante, ser função da temperatura e das concentrações das espécies do meio participante. Assim, a RTE pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial I}{\partial S} = -\kappa I + \kappa I_{CN}(T) \quad (2.67)$$

Apesar deste modelo ser muito simples, representando de maneira rudimentar o comportamento espectral real do meio participante, este modelo segue sendo muito utilizado na solução de problemas acoplados de fluidodinâmica, combustão e radiação térmica, devido à elevada complexidade de se resolver em detalhes cada uma dessas classes de problemas, sendo então necessária a simplificação em alguns de seus aspectos de forma a viabilizar o seu estudo. Assim, devido ao seu caráter simples em relação aos demais modelos de propriedades radiativas (tais como WSGG, SLW, CW, FSK, FSCK, e até o mesmo o LBL citado anteriormente), o modelo de gás cinza tem sido a forma escolhida de simplificar a solução da

RTE em alguns estudos, como pode ser encontrado nos trabalhos de [Wen et al., 2007; Lin et al., 2010; Centeno, 2014; Cassol et al., 2015; Sikanen e Hostikka, 2016; Fraga, 2016].

Nesta seção serão apresentadas as variantes do modelo de gás cinza selecionadas para o presente trabalho para a modelagem do coeficiente de absorção da mistura gases-fuligem: modelo de gás cinza padrão do FDS (denominado como GC₁), modelo de gás cinza reportado por Cassol et al. (2015) (denominado como GC₂), e modelo de gás cinza baseado no WSGG (denominado como GC₃).

2.8.1 Modelo de gás cinza padrão do FDS (GC₁)

Para a determinação do coeficiente de absorção no modelo de gás cinza padrão do software FDS, a partir de agora denominado (GC₁), um modelo de banda estreita, denominado RADCAL, desenvolvido por Grosshandler, 1993, está disponível. O RADCAL calcula as propriedades espectrais das espécies participantes da transferência de calor radiativa em valores discretos do espectro e temperatura, e retorna duas alternativas de coeficientes de absorção médios para cada banda espectral, n [McGrattan et al., 2017a]. O primeiro coeficiente é o coeficiente médio de Planck expressado da seguinte forma:

$$\kappa_n(P, T) = \frac{\pi}{\sigma T^4} \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} I_{b,\lambda}(T) \sum_i \bar{\kappa}(\lambda, T) P_i d\lambda \quad (2.68)$$

onde λ é o comprimento de onda, P_i é a pressão parcial da espécie i e $\bar{\kappa}_i$ é o coeficiente de absorção da espécie i . É importante ressaltar que a temperatura utilizada é a temperatura local do gás, assim $\kappa_n(P, T)$ é uma função da temperatura e da pressão parcial das espécies, sendo independentes do comprimento característico do caminho (*path length*).

O termo fonte é dado pela lei de Planck de distribuição de corpo negro que expressa a taxa de equilíbrio da energia radiativa emitida pelo corpo negro em determinada temperatura, T , como função do comprimento de onda λ :

$$I_{b,\lambda}(T) d\lambda = \frac{2hc^2\lambda^{-5}}{\exp\left(\frac{hc}{k_B\lambda T}\right) - 1} d\lambda \quad (2.69)$$

onde, h é a constante de Planck ($6,626 \times 10^{-34}$ J·s), c é a velocidade da luz no vácuo ($2,998 \times 10^8$ m/s), e k_B é a constante de Boltzmann ($1,381 \times 10^{-23}$ J/K).

O segundo coeficiente é chamado de coeficiente de absorção efetivo, $\kappa_{e,n}(T)$, sendo definido como:

$$\int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} I(\lambda, L, T, T_{rad}) d\lambda = \frac{\sigma}{\pi} \left[(1 - e^{-\kappa_{e,n}(T)L}) T^4 + e^{-\kappa_{e,n}(T)L} T_{rad}^4 \right] \quad (2.70)$$

onde L é o comprimento característico do caminho (*path length*) e T_{rad} denomina-se como temperatura efetiva. O RADCAL calcula a integral do lado esquerdo da Equação 2.70 através do cálculo da intensidade, deixando uma camada de gás uniforme de espessura equivalente a L , delimitada por uma parede negra a temperatura T_{rad} , para várias bandas espectrais estreitas. A espessura L , por padrão do software, é considerada de tamanho igual a cinco vezes o tamanho do volume de controle utilizado na simulação. Este comprimento é limitado em um valor máximo de 10 m.

Em casos que possuem apenas uma banda ($N=1$), que é o caso quando se utiliza o modelo GC, o menor dos dois coeficientes de absorção é utilizado conforme Equação 2.71.

$$\kappa_n = \min(\kappa_n(P, T), \kappa_{e,n}(T)) \quad (2.71)$$

Em casos em que o número de bandas é maior que 1; utiliza-se o coeficiente de absorção obtido pela Equação 2.68.

2.8.2 Modelo de gás cinza de Cassol et al., 2015 (GC₂)

O modelo de gás cinza reportado em Cassol et al., 2015, denominado de (GC₂) nesta dissertação, apresenta correlações para o coeficiente de absorção que foram ajustadas a partir de dados espectrais do banco de dados HITEMP 2010 [Rothman et al., 2010] para os gases (CO₂ e H₂O) e a partir da relação linear no espectro para a fuligem [Siegel e Howell, 2002; Modest, 1993; Hottel e Sarofim, 1967], empregando a seguinte relação para cada espécie participante, separadamente,

$$\kappa = \frac{\int_{\eta} \kappa_{\eta} I_{\eta,b} d\eta}{\int_{\eta} I_{\eta,b} d\eta} \quad (2.72)$$

As correlações empregadas no modelo GC₂ utilizam relações polinomiais dependentes da temperatura e das concentrações locais de CO₂ e H₂O para calcular o coeficiente de absorção de cada espécie química gasosa (H₂O e CO₂), conforme a Equação 2.73. Para a fuligem se utiliza a relação dada na Equação 2.74, em função da temperatura e da fração volumétrica de fuligem locais. Após o cálculo dos coeficientes de absorção de cada uma das espécies químicas (CO₂, H₂O, fuligem) o coeficiente de absorção total é dado pela Equação 2.75.

$$\kappa_i = p_i (c_0 + c_1 T + c_2 T^2 + c_3 T^3 + c_4 T^4 + c_5 T^5) \quad (2.73)$$

$$\kappa_{soot} = b f_v (c_0 + c_1 T + c_2 T^2) \quad (2.74)$$

$$\kappa(x) = \kappa_{H_2O}(x) + \kappa_{CO_2}(x) + \kappa_{soot}(x) \quad (2.75)$$

onde na Equação 2.73 o sub-índice i representa a espécie química (H₂O ou CO₂), p_i representa a pressão parcial, f_v é a fração volumétrica da fuligem e b é uma constante que depende do combustível (como por exemplo, 6,3 para o óleo combustível, 4,9 para o propano, 4,1 para o metano, 4,0 para o acetileno, 3,7-7,5 para o carvão). No presente trabalho, os combustíveis utilizados são etanol, metanol e n-heptano, os quais não possuem valores na literatura para b ; dessa maneira, adotou-se o valor de $b = 5$ para este trabalho por ser o valor médio entre aqueles reportados para outros combustíveis. Os coeficientes c_0 , c_1 , c_2 , c_3 , c_4 e c_5 das Equações 2.73 e 2.74 para cada espécie química estão apresentados na Tabela 2.1. Deve-se observar ainda que o modelo GC₂ não depende do comprimento característico do caminho (L , *path length*), sendo esta uma vantagem importante deste modelo, e motivo de sua seleção, em relação aos outros empregados neste trabalho, uma vez que a escolha de L pode ser considerada um tanto arbitrária. A definição de L é ainda um tema de pesquisa aberto, conforme descrito no relatório de planejamento de pesquisas para melhorias do FDS reportado em McDermott, 2017.

Tabela 2.1 - Coeficientes polinomiais para o cálculo do coeficiente de absorção do modelo GC₂ de Cassol et al., 2015.

H ₂ O e CO ₂	$i = H_2O$	$i = CO_2$
c_0 (cm ⁻¹ atm ⁻¹)	$7,5701 \times 10^{-1}$	$-6,4750 \times 10^{-1}$
c_1 (cm ⁻¹ atm ⁻¹ K ⁻¹)	$-1,9716 \times 10^{-3}$	$4,2895 \times 10^{-3}$
c_2 (cm ⁻¹ atm ⁻¹ K ⁻²)	$2,1998 \times 10^{-6}$	$-6,6089 \times 10^{-6}$

	c_3 (cm ⁻¹ atm ⁻¹ K ⁻³)	$-1,2492 \times 10^{-9}$	$4,4190 \times 10^{-9}$
	c_4 (cm ⁻¹ atm ⁻¹ K ⁻⁴)	$3,5385 \times 10^{-13}$	$-1,3796 \times 10^{-12}$
	c_5 (cm ⁻¹ atm ⁻¹ K ⁻⁵)	$-3,9663 \times 10^{-17}$	$1,6484 \times 10^{-16}$
<hr/>			
Fuligem			
	c_0 (cm ⁻¹)	-281,19	
	c_1 (cm ⁻¹ K ⁻¹)	3,7161	
	c_2 (cm ⁻¹ K ⁻²)	$-6,7737 \times 10^{-4}$	

* Validade das correlações: temperaturas entre 400 e 2500 K.

2.8.3 Modelo de gás cinza baseado no WSGG (GC₃)

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG, do inglês *Weighted-Sum-of-Gray-Gases*) foi inicialmente proposto por Hottel e Sarofim, 1967. Este modelo pode ser aplicado para geometrias arbitrárias, sendo o espectro inteiro representado por um número definido de gases cinza com coeficiente de absorção constante no lugar dos gases não-cinza e também as janelas transparentes [Modest, 2003]. Uma ponderação para cada gás cinza é feita e esta ponderação é equivalente à fração de energia emitida por um corpo negro na temperatura do gás em uma determinada região espectral.

A Figura 2.6 representa o coeficiente de absorção, κ_χ , e as janelas transparentes para o WSGG para J_χ gases cinzas. O índice χ representa a espécie química componente do meio participante (vapor d'água, dióxido de carbono ou fuligem).

A partir do ajuste da emitância total usando dados espectrais do banco de dados HITEMP 2010 [Rothman et al., 2010] para os gases (CO₂ e H₂O) e a partir da relação linear no espectro para a fuligem [Siegel e Howell, 2002; Modest, 1993; Hottel e Sarofim, 1967], Cassol et al., 2014, reportaram valores para o coeficiente de absorção de cada espécie participante no modelo WSGG, assim como expressões para o coeficiente de ponderação em função da temperatura $a_{\chi,j}$, que é dado pelas Equações 2.76 e Equação 2.77 respectivamente:

$$\kappa_{\chi,j} = p_\chi \cdot \kappa_{p,\chi,j} \quad (2.76)$$

$$a_{\chi,j}(T) = \sum_{k=1}^{K_\chi} b_{\chi,j,k} T^{k-1} \quad (2.77)$$

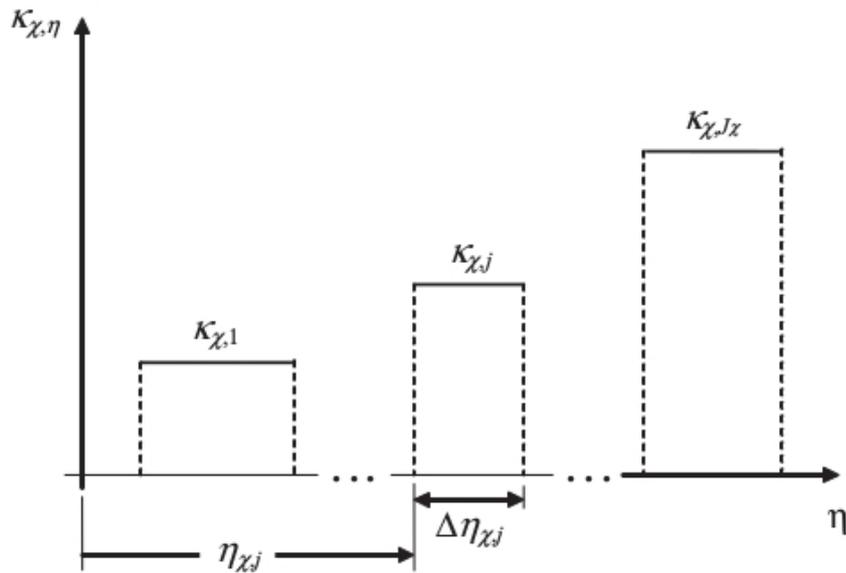


Figura 2.6 - Representação de gases cinzas modelos através do WSGG [adaptado de Cassol et al., 2014].

onde o $b_{\chi,j,k}$ é o coeficiente polinomial de cada espécie. Como no modelo WSGG também existem as janelas transparentes além dos gases cinza, nesse caso, considera-se o coeficiente de absorção como sendo nulo, $\kappa_{\chi,0} = 0$. A fim de manter a conservação de energia, o coeficiente de ponderação em função da temperatura deve satisfazer a seguinte relação:

$$\sum_{j=0}^{J_{\chi}} a_{\chi,j}(T) = 1 \quad (2.78)$$

Para se obter o coeficiente de ponderação em função da temperatura para a janela transparente, utiliza-se a seguinte relação:

$$a_{\chi,0}(T) = 1 - \sum_{j=1}^{J_{\chi}} a_{\chi,j}(T) \quad (2.79)$$

Os valores de $k_{p,\chi,j}$ e de $b_{\chi,j,k}$ de cada espécie química, reportados por Cassol et al., 2014, estão mostrados nas Tabelas 2.2 e 2.3. Para o H_2O e CO_2 adota-se a nomenclatura $\chi = w$ e $\chi = c$, respectivamente. Os coeficientes $k_{p,\chi,j}$ e de $b_{\chi,j,k}$ foram obtidos a partir de ajustes da emitância total calculada a partir da integração LBL das linhas espectrais de absorção geradas

pelo HITEMP 2010. Os valores obtidos para os coeficientes são válidos para temperaturas entre 400 e 2500 K e para $0,001 \text{ atm}\cdot\text{m} \leq (p_w + p_c)\cdot L \leq 10 \text{ atm}\cdot\text{m}$.

Tabela 2.2 - Coeficientes WSGG para H₂O com quatro gases cinza de Cassol et al., 2014.

j	$K_{p,wj} \text{ (atm m)}^{-1}$	$b_{wj,1}$	$b_{wj,2} \text{ (K}^{-1}\text{)}$	$b_{wj,3} \text{ (K}^{-2}\text{)}$	$b_{wj,4} \text{ (K}^{-3}\text{)}$	$b_{wj,5} \text{ (K}^{-4}\text{)}$
1	0,171	0,06617	$55,48 \times 10^{-5}$	$-48,41 \times 10^{-8}$	$22,27 \times 10^{-11}$	$-40,17 \times 10^{-15}$
2	1,551	0,11045	$0,576 \times 10^{-5}$	$24,00 \times 10^{-8}$	$-17,01 \times 10^{-11}$	$30,96 \times 10^{-15}$
3	5,562	-0,04915	$70,63 \times 10^{-5}$	$-70,12 \times 10^{-8}$	$26,07 \times 10^{-11}$	$-34,94 \times 10^{-15}$
4	49,159	0,23675	$-18,91 \times 10^{-5}$	$-0,907 \times 10^{-8}$	$4,082 \times 10^{-11}$	$-8,778 \times 10^{-15}$

* Validade das correlações: temperaturas entre 400 e 2500 K.

Tabela 2.3 - Coeficientes WSGG para CO₂ com quatro gases cinza de Cassol et al., 2014.

j	$K_{p,cj} \text{ (atm m)}^{-1}$	$b_{cj,1}$	$b_{cj,2} \text{ (K}^{-1}\text{)}$	$b_{cj,3} \text{ (K}^{-2}\text{)}$	$b_{cj,4} \text{ (K}^{-3}\text{)}$	$b_{cj,5} \text{ (K}^{-4}\text{)}$
1	0,138	0,09990	$64,41 \times 10^{-5}$	$-86,94 \times 10^{-8}$	$41,27 \times 10^{-11}$	$-67,74 \times 10^{-15}$
2	1,895	0,00942	$10,36 \times 10^{-5}$	$-2,277 \times 10^{-8}$	$-2,134 \times 10^{-11}$	$6,497 \times 10^{-15}$
3	13,301	0,14511	$-30,73 \times 10^{-5}$	$37,65 \times 10^{-8}$	$-18,41 \times 10^{-11}$	$30,16 \times 10^{-15}$
4	340,811	-0,02915	$25,23 \times 10^{-5}$	$-26,10 \times 10^{-8}$	$9,965 \times 10^{-11}$	$-13,26 \times 10^{-15}$

* Validade das correlações: temperaturas entre 400 e 2500 K.

Analogamente, os coeficientes $k_{fv,sj}$ e de $b_{fv,s,k}$ reportados em Cassol et al., 2014, para a fuligem são mostrados na Tabela 2.4, considerando 4 gases cinza. A nomenclatura adotada nesse caso é $\chi = s$. Como é mais comum apresentar a concentração de fuligem pela fração volumétrica do que pela pressão parcial a tabela fornece um valor de coeficiente de absorção baseado na fração volumétrica e assim o coeficiente de absorção pode ser calculado através de:

$$\kappa_{s,j}(x) = f_v(x) \alpha \kappa_{fv,s,j} \quad (2.80)$$

onde, $\kappa_{s,j}$ é o coeficiente de absorção, f_v é a fração volumétrica de fuligem, α é uma constante adimensional (com valor adotado de 5, como explicado na seção anterior – coeficiente b) e $\kappa_{fv,sj}$ é o coeficiente de absorção baseado na fração volumétrica.

Tabela 2.4 - Coeficientes WSGG para fuligem com quatro gases cinza de Cassol et al., 2014.

j	$\kappa_{fv,sj} \text{ (m)}^{-1}$	$b_{sj,1}$	$b_{sj,2} \text{ (K}^{-1}\text{)}$	$b_{sj,3} \text{ (K}^{-2}\text{)}$	$b_{sj,4} \text{ (K}^{-3}\text{)}$	$b_{sj,5} \text{ (K}^{-4}\text{)}$
---	-----------------------------------	------------	------------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	------------------------------------

1	2875,86	0,00129	$-0,545 \times 10^{-5}$	$0,123 \times 10^{-7}$	$-0,847 \times 10^{-11}$	$1,6807 \times 10^{-15}$
2	39234,9	1,26110	$-319,2 \times 10^{-5}$	$27,72 \times 10^{-7}$	$-100,5 \times 10^{-11}$	$132,8 \times 10^{-15}$
3	160748,0	-0,25757	$362,1 \times 10^{-5}$	$-40,12 \times 10^{-7}$	$154,9 \times 10^{-11}$	$-207,8 \times 10^{-15}$
4	495898,0	0,07980	$-72,08 \times 10^{-5}$	$15,87 \times 10^{-7}$	$-70,89 \times 10^{-11}$	$97,69 \times 10^{-15}$

* Validade das correlações: temperaturas entre 400 e 2500 K.

Como o modelo WSGG resolve uma RTE para cada gás cinza, isso pode elevar o custo computacional de maneira a inviabilizar o seu uso, especialmente para problemas com misturas de CO₂, H₂O e fuligem, trazendo a necessidade de resolver a RTE para uma centena de gases cinza em cada volume de controle, como seria o caso no presente trabalho (ao calcular o coeficiente de absorção e o coeficiente de ponderação no WSGG, seriam necessárias $((4+1)_w \times (4+1)_c \times (4)_s = 100$ RTEs). Alternativamente, podem-se empregar as propriedades radiativas obtidas com o modelo WSGG na forma de um modelo de gás cinza, sendo assim necessário resolver apenas uma RTE em cada volume de controle. Esta metodologia é conhecida como modelo de gás cinza baseado no WSGG (aqui denominada como GC₃). Embora este modelo de gás cinza baseado no WSGG ainda não seja muito utilizado, é possível encontrar na literatura trabalhos que utilizam modelos de banda simples e modelos não cinza baseados no WSGG [Cavallo Marincola, 2013; Guedri et al., 2011; Kim et al., 2008], entretanto deve-se observar que o software Ansys Fluent implementa o modelo WSGG desta forma.

Dessa maneira, no presente trabalho o modelo WSGG anteriormente citado (conforme reportado em Cassol et al., 2014, foi utilizado para obtenção de um coeficiente de absorção único para a mistura gases-fuligem, sendo assim necessário resolver apenas uma RTE, tornando o modelo computacional mais rápido quando comparado ao modelo WSGG convencional. Para ser possível encontrar apenas um coeficiente de absorção total utilizou-se primeiramente as relações de Cassol et al., 2014, para a obtenção de um coeficiente de absorção e do coeficiente de ponderação em função da temperatura para a mistura de H₂O, CO₂ e fuligem através das seguintes equações, com $\chi = m$:

$$\kappa_{m,j_m}(\chi) = \kappa_{w,j_w}(\chi) + \kappa_{c,j_c}(\chi) + \kappa_{s,j_s}(\chi) \quad (2.81)$$

$$a_{m,j_m}(\chi) = a_{w,j_w}(\chi) \times a_{c,j_c}(\chi) \times a_{s,j_s}(\chi) \quad (2.82)$$

onde j_m corresponde a cada gás cinza da mistura gases-fuligem no modelo WSGG, enquanto a quantidade total de gases cinza da mistura é dada por $J_m = (J_w+1) \times (J_c+1) \times J_s =$

$(4+1)_w \times (4+1)_c \times (4)_s = 100$. Após obtidos os coeficientes da mistura calcula-se então a emitância total através da Equação 2.83 aplicada à mistura, válida para o modelo WSGG:

$$\varepsilon_m = \sum_{j=1}^{J_m} a_{m,j_m}(T) [1 - \exp(-\kappa_{m,j_m} L)] \quad (2.83)$$

A partir da emitância total da mistura obtida com a Equação 2.83, calcula-se um coeficiente de absorção, Equação 2.84, sendo este utilizado na solução da RTE e assim configurando o modelo de gás cinza baseado no WSGG, denominado de GC₃ neste trabalho:

$$\kappa = \frac{1}{L} \ln \left(\frac{1}{1 - \varepsilon_m} \right) \quad (2.84)$$

onde, κ é o coeficiente de absorção local utilizado para o GC₃, o qual é função da composição (H₂O, CO₂, fuligem) e temperatura locais, L é o *path length* e ε_m é a emitância total da mistura.

3 METODOLOGIA

No Capítulo 2 apresentou-se o equacionamento do problema, tanto em termos de equações gerais que regem o fenômeno, quanto aquelas empregadas diretamente no software FDS. Neste capítulo tem-se uma apresentação geral sobre o software FDS. Ainda, serão apresentados os casos de incêndios empregados nas simulações, os quais serviram para testar os diferentes modelos de gás cinza: (1) incêndio em poça de etanol em compartimento sem aberturas, (2) incêndio em poça de n-heptano em ambiente aberto, (3) incêndio em poça de metanol em compartimento com abertura.

3.1 O software *Fire Dynamics Simulator* (FDS)

O FDS foi criado através da colaboração entre o *National Institute of Standards and Technology* (NIST) e *VTT Technical Research Centre of Finland*. É um software de simulação numérica baseado na dinâmica dos fluidos computacional desenvolvido inicialmente e principalmente para a modelagem de incêndios. Cerca de metade de suas aplicações é para modelagem da dispersão de fumaça, assim como detectores (fumaça, calor etc.) e *sprinklers*. A outra metade de suas mais costumeiras aplicações consiste em reconstruções de incêndios residenciais e industriais. Conforme o FDS foi se desenvolvendo, mais ele tem sido utilizado para resolver problemas de incêndios práticos e também em problemas da engenharia de proteção contra incêndios, ao mesmo tempo que fornece uma boa ferramenta para o estudo fundamental da dinâmica em escoamentos dirigidos pelo calor [McGrattan et al., 2017b].

O software é de domínio público e disponibilizado gratuitamente pelo NIST através de seu site. Colaboradores, codesenvolvedores e pesquisadores convidados atualizam periodicamente o software a fim de corrigir problemas e implementar mais ferramentas ao mesmo [McGrattan et al., 2017b].

O desenvolvimento do software foi feito através da linguagem de programação Fortran 90 e seu código baseia-se em uma rotina principal com várias sub-rotinas que são chamadas ao decorrer da rotina principal, que tem por objetivo unir as sub-rotinas e resolver o problema acoplado. As sub-rotinas são responsáveis por cada um dos fenômenos existentes, como exemplo, a rotina de radiação é responsável pela modelagem da radiação e a rotina de combustão é responsável apenas pela modelagem da combustão. Existem também sub-rotinas responsáveis pela construção da geometria e construção da malha. Ainda com respeito a rotinas computacionais, o FDS tem a grande vantagem de ser um software *open-source*, isto quer dizer que seu código fonte pode ser adaptado e modificado para estudos mais específicos

em alguma área. Neste trabalho, essa vantagem do FDS foi muito útil, pois permitiu que fosse possível alterar as rotinas de radiação para estudar modelos de gás cinza diferentes daquele originalmente implementado no software.

Para o modelo hidrodinâmico, o FDS resolve numericamente as equações de Navier-Stokes para baixo número de Mach. O algoritmo utiliza um esquema preditor-corretor explícito, de segunda ordem. Para a turbulência utiliza-se a metodologia LES, mas existe também a possibilidade de utilizar DNS, embora impraticável para a solução de problemas de engenharia. Para a maioria das aplicações, a combustão é resolvida em um único passo, utilizando o conceito de espécies agrupadas. As espécies “ar” e “combustível” são espécies explicitamente computadas. O modelo de radiação inclui a solução da RTE para gás cinza, mas é possível utilizar o modelo de banda larga. A RTE é resolvida através de um método de volumes finitos. Os coeficientes de absorção das misturas gases-fuligem são computados pela utilização do modelo RADCAL de banda estreita, tanto para o modelo de gás cinza (GC-FDS), quanto para o modelo de banda larga. A geometria é feita através de malhas retilíneas, sendo possível a utilização de múltiplas malhas para otimizar o tempo computacional (neste caso, o software emprega a paralelização de processamento utilizando o OpenMP, que é uma interface de programação que utiliza diversas unidades de processamento em uma máquina ou também em *clusters*).

Uma particularidade do software FDS é o emprego da aproximação para baixo número de Mach. Rehm e Baum, 1978, observaram que para aplicações com baixas velocidades, como em incêndios, a pressão resolvida espacialmente e temporalmente, p , pode ser decomposta em uma pressão *background*, $\bar{p}(z, t)$, mais uma perturbação, $\tilde{p}(x, y, z, t)$, com somente a pressão *background* sendo mantida na equação de estado (lei de gás ideal):

$$\bar{p} = \rho TR \sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{W_{\alpha}} \equiv \frac{\rho RT}{\bar{W}} \quad (3.1)$$

Observa-se que z é a coordenada espacial na direção da gravidade; assim, a estratificação da atmosfera está incluída na pressão *background*. A perturbação, \tilde{p} , conduz o movimento do fluido. Como consequência da aproximação para baixo número de Mach, a energia interna, e , e a entalpia, h , devem ser relacionadas em termos da pressão termodinâmica (*background*): $h = e + \bar{p}/\rho$. A equação da conservação de energia deve então ser escrita em termos da entalpia sensível, h_s :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h_s) + \nabla \cdot (\rho h_s u) = \frac{D\bar{p}}{Dt} + \dot{q}''' + \dot{q}_b''' - \nabla \cdot \dot{q}'' \quad (3.2)$$

o termo \dot{q}''' é a taxa de liberação de calor por unidade de volume em uma reação química. O termo \dot{q}_b''' é a energia transferida para gotículas (*droplets*) e partículas da escala sub-malha (não aplicável no presente estudo). O termo \dot{q}'' representa os fluxos de calor condutivo, difusivo e radiativo. No FDS, a Equação 3.2 não é resolvida explicitamente, ao invés disso, o divergente da velocidade é isolado como segue:

$$\nabla \cdot u = \frac{1}{\rho h_s} \left[\frac{D}{Dt}(\bar{p} - \rho h_s) + \dot{q}''' + \dot{q}_r''' + \dot{q}_b''' - \nabla \cdot \dot{q}'' \right] \quad (3.3)$$

O *solver* hidrodinâmico do FDS garante que a Equação 3.3 seja satisfeita, sendo assim, a Equação 3.2 também é satisfeita (pela conservação de energia) [McGrattan et al., 2017a].

Em relação ao esquema temporal, uma vez que o FDS emprega um método explícito, o critério de estabilidade de Courant-Friedrichs-Lewy (também conhecido como restrição CFL) é adotado e é usado na determinação do passo de tempo necessário para manter a solução estável e obter soluções fisicamente praticáveis. A restrição CFL, dada por:

$$CFL = \delta t \frac{\|u\|}{\delta x} \approx 1 \quad (3.4)$$

impõe uma restrição no passo de tempo devido à velocidade. Fisicamente, a restrição CFL estabelece que um elemento de fluido não deve atravessar mais do que uma célula dentro de um passo de tempo. Se fosse empregar um esquema temporal implícito com o objetivo de usar passos de tempo, por exemplo, 10 vezes superior do que o limite CFL, os menores vórtices turbulentos que poderiam ser resolvidos seriam então grosseiramente 10 vezes o espaçamento da malha, o que limitaria seriamente o benefício do LES. Em muitas situações, caso se deseje que a simulação seja executada com mais rapidez, uma estratégia melhor é engrossar a resolução da malha enquanto se mantém $CFL \approx 1$ [McGrattan et al., 2017a].

Neste trabalho utilizou-se a versão 6.5.3 do software, empregando o seu modelo de gás cinza padrão (GC_1), e também implementando na rotina de radiação dois novos modelos de gás cinza (GC_2 e GC_3). Essa versão foi escolhida por ser a mais recente no início dos estudos, atualizada em 22 de Janeiro de 2017, e não foi mais alterada no decorrer do trabalho. O software não foi atualizado para manter a base do código computacional, apenas mudando os

modelos de gás cinza aplicados, e também porque a atualização do programa poderia desencadear erros nas rotinas já alteradas.

3.2 Descrição dos casos de incêndio

Esta seção apresenta informações sobre os três casos de incêndio estudados e empregados na avaliação dos modelos de gás cinza. As informações dizem respeito às geometrias e instrumentos de medição (posições de termopares e sensores de radiação térmica), condições iniciais e de contorno, propriedades termofísicas e termoquímicas dos materiais e demais parâmetros necessários para a realização das simulações.

3.2.1 Configurações geométricas

Os problemas analisados neste trabalho consistem em incêndios em poças, nas quais busca-se analisar os campos de temperatura, fluxo de calor radiativo e campos de concentração de vapor d'água, dióxido de carbono e fuligem gerados pelo incêndio. Para este trabalho, três diferentes casos de incêndio foram selecionados. Tais casos estão relatados nos estudos experimentais de Tu et al., 2013, Lin et al., 2010, e Sahu et al., 2015, sendo que para cada caso os três modelos de gás cinza foram avaliados (GC_1 , GC_2 e GC_3), conforme será apresentado no Capítulo 5.

No primeiro caso, relatado no estudo experimental de Tu et al., 2013, a geometria consiste em uma sala totalmente fechada, como pode ser visto na Figura 3.1(a). No centro desta sala se encontra um recipiente retangular, na altura do piso, contendo combustível líquido e assim caracterizando a fonte de combustível do incêndio em poça mostrada na Figura 3.1(b). As dimensões do recipiente são $a = 300$ mm, $b = 300$ mm com uma profundidade de 40 mm. O recipiente é feito de aço e tem uma espessura de 2 mm, e a superfície da poça de etanol está situada 14 mm acima do fundo do recipiente sendo que este volume de combustível é mantido constante sendo de aproximadamente 1000 g de etanol. Diversos termopares foram utilizados para medir as temperaturas da chama em diversas posições acima do seu centro. O termopar T_2 está situado 8 mm acima do fundo do recipiente, o T_4 é posicionado 140 mm acima do fundo do recipiente. A partir desta altura os termopares T_5 - T_{10} são regularmente espaçados de 200 mm entre eles. Dois termopares foram colocados nas paredes laterais na superfície externas da panela (T_1 e T_3) como mostrados na figura. Estes dois termopares estão localizados a 150 mm das extremidades laterais a uma altura de 8 mm acima do fundo do recipiente. Para a medição do fluxo de calor radiativo, foram utilizados

dois radiômetros (R_1 e R_2), distantes a 1,5 m do centro da poça e 50 mm acima da superfície do recipiente.

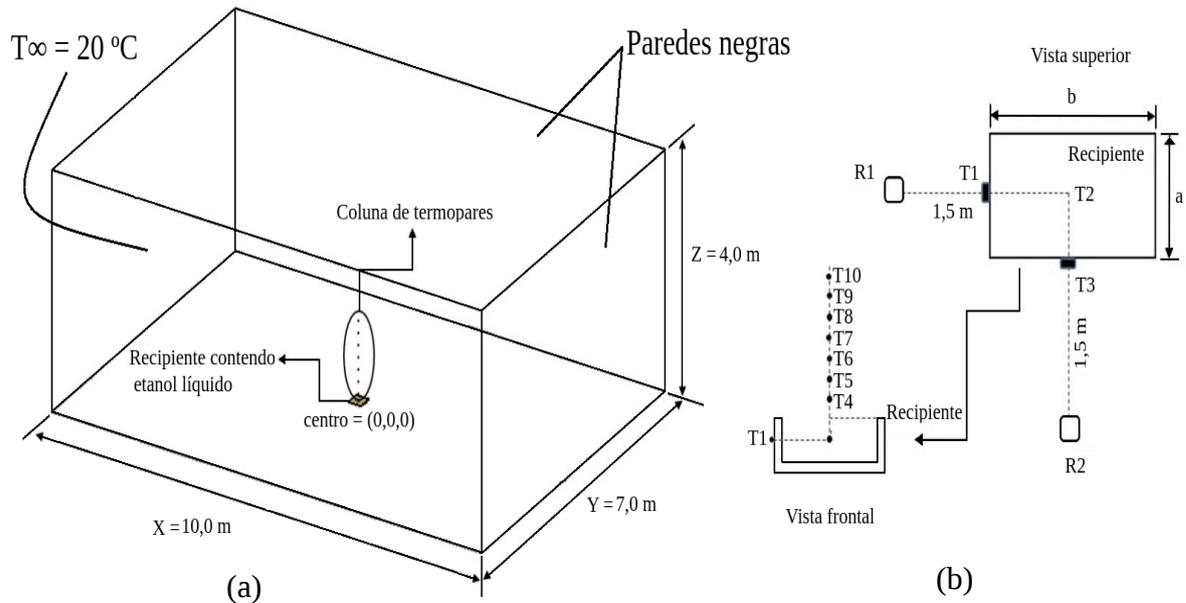


Figura 3.1 - Caso 1 – Tu et al., 2013: (a) Domínio computacional empregado e (b) Aparato experimental.

Para o segundo caso, reportado em Lin et al., 2010, a poça de combustível está em um ambiente totalmente aberto, como pode ser visto na Figura 3.2(a). Também pode se observar uma coluna de radiômetros que é utilizada para a medição do fluxo de calor radiativo. Os radiômetros estão posicionados na posição $x = -750$ mm, $y = 0$ variando verticalmente no eixo z . Começando pelo posicionamento do radiômetro mais abaixo, o R_1 , até o radiômetro mais próximo do teto, R_8 , as alturas são respectivamente de $z = 10, 200, 300, 500, 800, 1100, 1400$ e 1700 mm. Para este caso a panela tem geometria cilíndrica com $D = 300$ mm e altura 100 mm, mostrado na Figura 3.2(b), e nesta panela existe certa quantidade de água por baixo do combustível. Conforme apresentado por Lin et al., 2010, a água é utilizada para refrigerar o combustível no topo da poça e a quantidade de água é mantida fixa e 2 mm abaixo da borda superior da panela. Estes 2 mm de diferença entre a água e a borda da panela são preenchidos com o combustível líquido (n-heptano).

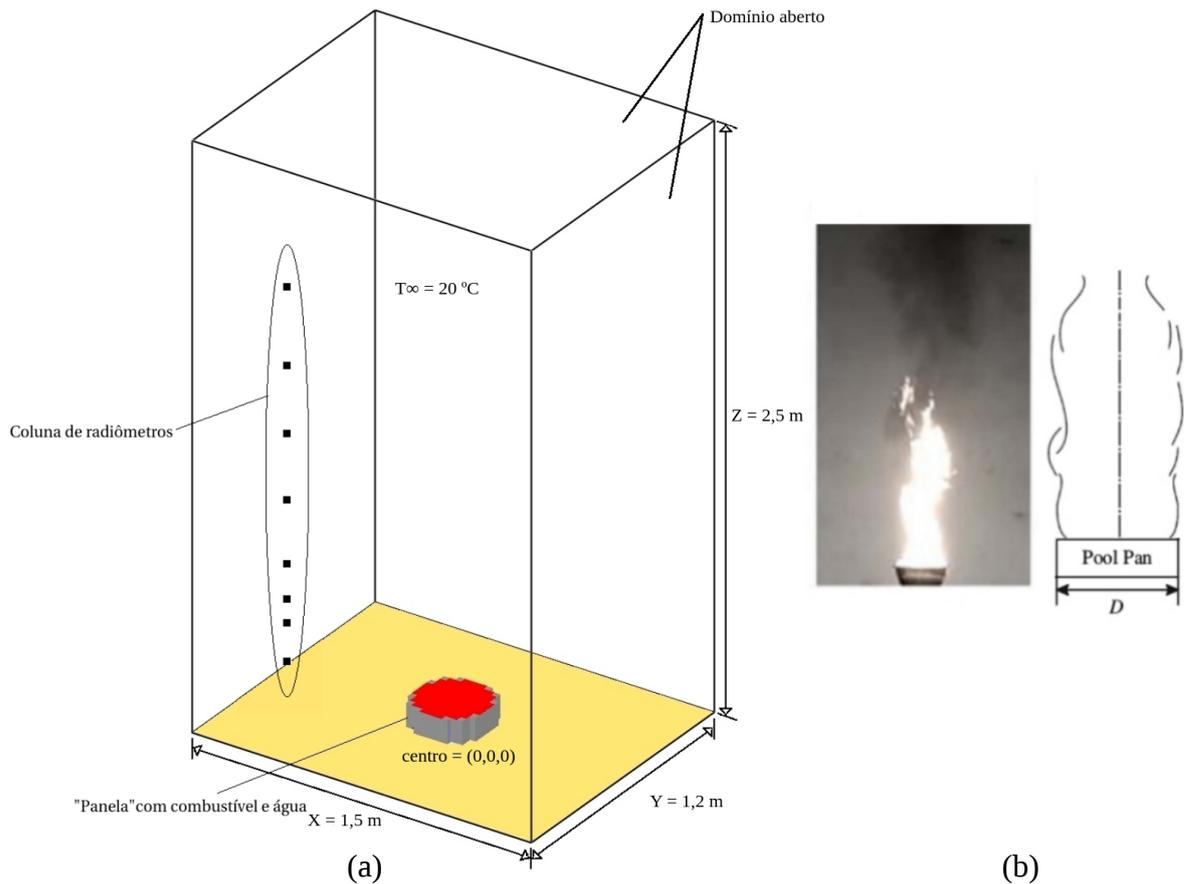


Figura 3.2 - Caso 2 – Lin et al., 2010: (a) Domínio computacional e (b) Geometria do recipiente [adaptado de Lin et al., 2010].

O terceiro caso baseia-se nos estudos de Sahu et al., 2015. Neste caso a geometria pode ser considerada como um cenário de incêndio intermediário em relação aos dois casos anteriores. A geometria consiste em uma sala que possui a abertura de uma porta, o que pode ser visto na Figura 3.3. Neste caso três colunas de termopares, uma no centro da sala sobre a poça de combustível, outra no canto da sala e a última na abertura da porta (mostrados por B, C, e D na Figura 3.3). Termopares também foram fixados a uma distância de 1 m abaixo do teto da sala. Nas paredes foram instalados radiômetros para medir o fluxo de calor total nas várias superfícies do compartimento. A panela onde se encontra o combustível está representada por A e tem tamanho $D = 600$ mm, com 150 mm de altura.

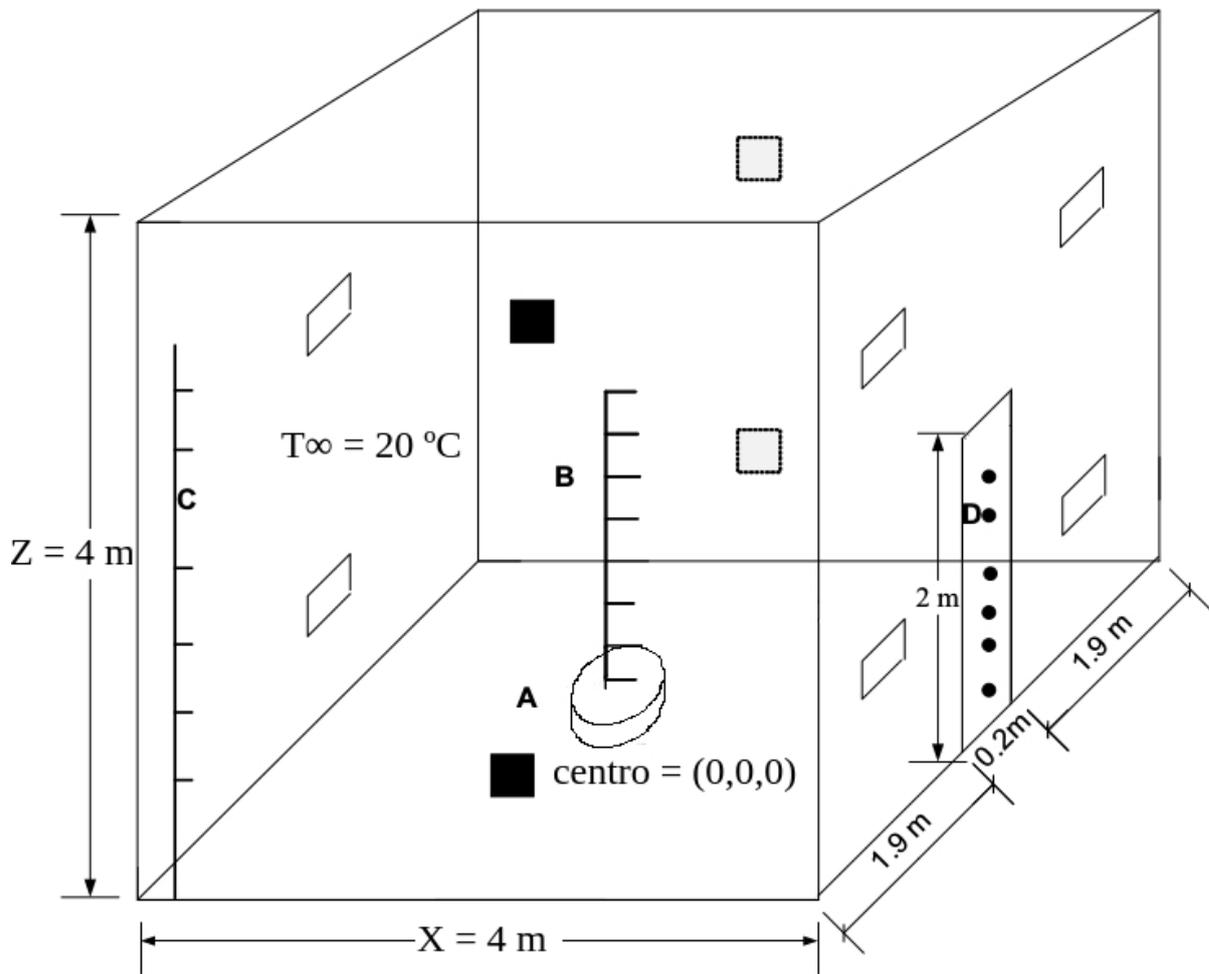


Figura 3.3 - Caso 3 – Sahu et al., 2015: domínio computacional e instrumentação [adaptado de Sahu et al., 2015].

Na Figura 3.3 os termopares são representados pelas colunas B, C e D e são posicionados da seguinte maneira: na posição B a coluna de termopares está localizada bem no centro da sala e no centro da poça e somente a posição vertical é alterada, o primeiro termopar está a 300 mm do chão o segundo dista 100 mm do primeiro e o terceiro está 100 mm espaçado do segundo. Os demais 12 termopares da coluna são verticalmente espaçados por uma distância de 150 mm. A coluna de termopares da posição C é 250 mm distante de ambas as paredes e os termopares são regularmente espaçados por uma distância de 200 mm desde o chão até o último termopar estar a 200 mm do teto. A coluna D representa os termopares colocados na abertura da porta. Nesta posição o primeiro termopar está a 300 mm do chão sendo que o segundo e terceiro são igualmente espaçados. A partir do quarto termopar a distância entre ele diminui para 150 mm.

Os sensores de medição de fluxo de calor são representados na figura a partir dos retângulos mostrados nas paredes. Na parede que possui porta existem quatro sensores que estão localizados a 1 m de distância do centro da porta em alturas de 1 e 3 m. Nas demais paredes existem dois sensores que estão posicionados no centro destas paredes em alturas de 1 e 3 m.

3.2.2 Condições iniciais e condições de contorno

As condições de contorno adotadas foram obtidas da literatura específica de cada caso. No primeiro caso, Tu et al., 2013, as seguintes condições são consideradas. A temperatura inicial do interior da sala é $T_{\infty} = 20$ °C, a umidade do ar é de 55% e a pressão atmosférica é $p_{\infty} = 99,8$ kPa. Neste caso as paredes da sala são consideradas paredes negras porque a sala (10×7 m²) é muito maior que a poça de incêndio ($0,3 \times 0,3$ m²), e, assim, se considera que os efeitos sobre as paredes não influenciarão nos valores de campo de temperatura e fluxo de calor radiativo próximo à chama. As paredes, teto e piso deste problema são tratadas como superfícies negras e inertes porque não foram definidas no artigo citado e, devido ao tamanho do domínio, eles não devem influenciar no fluxo de calor medido, para este tipo de condição o software considera a temperatura ambiente para estas paredes. As propriedades do combustível líquido são apresentadas na Tabela 3.1. Como o incêndio é basicamente modelado como a injeção de combustível no queimador, que neste trabalho são as painéis contendo combustível, é essencial especificar ou taxa de liberação de calor por unidade de área ou a taxa de perda de massa de combustível por unidade de área, que foi o parâmetro utilizado para todos os casos desta dissertação, (*MLRPUA*, do inglês: *Mass Loss Rate Per Unit Area*) com unidade kg/(m²·s). Para este caso o *MLRPUA* = 0,018 kg/(m²·s) foi utilizado.

Para o segundo caso, Lin et al., 2010, a temperatura padrão inicial para o ambiente é $T_{\infty} = 20$ °C, com a umidade de 40% e a pressão atmosférica $p_{\infty} = 101,325$ kPa. Tendo em vista que nesse caso a poça está em ambiente aberto, não havendo paredes, deve-se especificar a condição de contorno “aberta” para as laterais e o topo do domínio computacional. Neste caso utilizou-se um *MLRPUA* = 0,0205 kg/(m²·s).

Para o terceiro caso, Sahu et al., 2015, a temperatura inicial para o ambiente é $T_{\infty} = 20$ °C, a umidade é 40% e pressão atmosférica $p_{\infty} = 101,325$ kPa. As paredes são consideradas paredes de tijolo, sendo que o software já possui as propriedades termofísicas para este material, com 15 cm de espessura. Na posição onde se encontra a porta foi estabelecida uma condição “aberta” para definir que naquela posição não existe parede e assim o software

utilizar as condições ambientes para esta posição. Para a poça de combustível foi utilizado um $MLRPUA = 0,0155 \text{ kg}/(\text{m}^2\cdot\text{s})$.

Cabe observar que a condição de contorno do tipo “aberta”, empregada nos casos 2 e 3, representa uma fronteira não-sólida do domínio computacional. Gases são permitidos escoar livremente para dentro e para fora. Nestas fronteiras, a temperatura e as frações mássicas das espécies tomam seus respectivos valores exteriores se o escoamento está entrando, e tomam seus respectivos valores da célula adjacente à fronteira se o escoamento está saindo; ou seja, esta é uma condição de contorno *upwind* [McGrattan et al., 2017a].

Os fluidos de trabalho utilizados são os combustíveis - etanol (Caso 1 - Tu et al., 2013), n-heptano (Caso 2 - Lin et al., 2010) e metanol (Caso 3 - Sahu et al., 2015) - e o ar ambiente, que age como oxidante na reação de combustão. As propriedades termofísicas utilizadas para cada combustível são mostradas na Seção 3.2.3. No Caso 2 – Lin et al., 2010 – tem-se ainda um lastro de água dentro da panela, conforme mencionado anteriormente.

A condição inicial das simulações é de temperatura igual à temperatura ambiente e a pressão inicial é a pressão da sala como dito anteriormente. Neste trabalho as medidas temporais realizadas para a obtenção e análise dos resultados são tomadas após o incêndio estar desenvolvido, em um período de tempo em que a variação do fluxo de calor radiativo é pequena, ou seja, um intervalo de tempo onde se pode considerar que o problema assumiu o comportamento de um problema em regime permanente.

3.2.3 Propriedades termofísicas e termoquímicas dos materiais e parâmetros das simulações

Para que seja possível a resolução numérica dos problemas abordados nesta dissertação, é necessária a correta implementação de diferentes propriedades termofísicas e termoquímicas de cada caso específico. Para a correta definição dos combustíveis no FDS se faz necessário estabelecer algumas propriedades específicas no código computacional. Por exemplo, para analisar o fluxo de calor radiativo é importante considerar os campos de fuligem, visto que a fuligem tem grande influência na transferência de calor por radiação. As propriedades utilizadas nesta dissertação foram retiradas dos trabalhos reproduzidos [Tu et al., 2013; Lin et al., 2010; Sahu et al., 2015] e também do manual técnico do software e estão apresentadas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Propriedades termofísicas e termoquímicas dos combustíveis e parâmetros das simulações.

	Caso 1 - Tu et al., 2013	Caso 2 - Lin et al., 2010	Caso 3 - Sahu et al., 2015
Combustível	etanol	n-heptano	metanol
Massa específica (kg/m ³)	789	684	796
Calor de reação (kJ/kg)	836,98	364,9	1099
Calor de combustão (kJ/kg)	29640	44600	22703
Temperatura de Ebulição (°C)	78,3	98,5	64,8
Massa de combustível (g)	1000	241,75	27000
Taxa de queima, \dot{m} (g/s)	1,62	1,45	4,4
Taxa de liberação de calor, \dot{q} (kW)	48,02	64,7	99,9
Tempo de simulação (s)	600	300	550 e 1000

4 VERIFICAÇÃO

Neste capítulo é apresentada a verificação e validação da metodologia numérica empregada no presente trabalho. Neste contexto, inicialmente será apresentado o estudo referente à discretização espacial do domínio de cálculo, seguindo para o estudo de discretização do ângulo sólido, o qual constitui uma etapa importante para o cálculo da equação da transferência radiativa, e por fim, apresenta-se a validação da metodologia através da comparação de resultados numéricos obtidos com o FDS com dados experimentais disponíveis na literatura [Tu et al., 2013]. Entende-se que não é necessário mostrar uma validação específica para os outros dois artigos, Lin et al., 2010; Sahu et al., 2015, porque essas comparações estarão presentes no capítulo seguinte (Capítulo 5 - Resultados).

4.1 Estudo da discretização espacial: qualidade de malha

Conforme reportado por Celik, 2005, não é possível encontrar uma discretização para LES em que os resultados não sejam mais influenciados pela malha, pois a correta discretização dessa escala seria a simulação numérica direta.

Nesta dissertação, foram utilizadas duas metodologias para a realização do estudo da discretização espacial do domínio de cálculo. Primeiramente comparam-se entre si os resultados das simulações obtidos com diferentes discretizações espaciais (diferentes quantidades de volumes de controle) e, em seguida, as malhas mais refinadas são analisadas através da metodologia da medida de resolução da turbulência (MTR), mostrado na Seção 2.2.6. Como foram utilizados diversos tamanhos de malha, refinando estas malhas a fim de se obter a correta discretização, o tempo computacional aumenta exponencialmente tendo em vista que o domínio tem grandes dimensões. Para que o tempo computacional não fosse demasiadamente longo adotou-se a seguinte simplificação: dividiu-se o domínio em diversas malhas e se refinou principalmente a malha que compreende o recipiente com a poça de combustível, a chama, suas proximidades e os sensores utilizados para a medição dos diversos parâmetros analisados.

Na Figura 4.1 encontra-se a distribuição de temperatura obtida na posição referente ao termopar “T₁” (cuja posição está mostrada na Figura 3.1) ao longo da simulação para cada uma das malhas testadas. Cabe ressaltar que os valores reportados na Figura 4.1 são valores médios calculados em um intervalo de tempo de $\Delta t = \pm 50$ s no entorno do tempo mostrado na figura, devido às flutuações temporais dos resultados numéricos. Observa-se que, quanto mais refinada a malha, menores são as variações de temperatura ao longo do tempo. Também nota-

se a grande importância de se utilizar uma malha compatível com as necessidades do problema, visto que para a malha menos refinada ($\Delta x = 20$ cm) chega a apresentar resultados até sete vezes maiores do que o resultado obtido pela malha mais refinada ($\Delta x = 2,5$ cm). A partir deste ponto considera-se que as malhas de $\Delta x = 5$ cm e $\Delta x = 2,5$ cm podem ser utilizadas quando se trata da temperatura no recipiente de um incêndio em poça. Como nesta dissertação o principal objetivo é analisar o fluxo de calor radiativo, outros parâmetros, como o número de ângulos sólidos discretos, ainda serão avaliados e, portanto, apenas ao final dessas avaliações a discretização espacial do domínio computacional poderá ser definida.

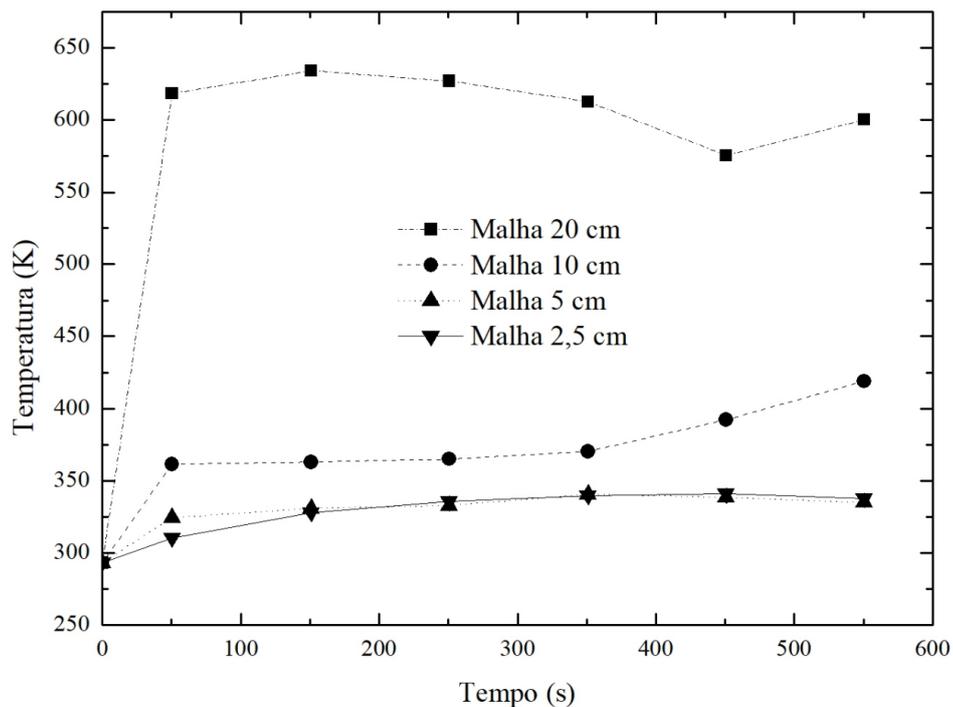


Figura 4.1 - Comparação da temperatura medida pelo termopar T_1 para todas as malhas testadas.

Na Tabela 4.1 são apresentados os valores de temperatura máxima, altura da chama e fluxo de calor radiativo (posição R_1) obtidos numericamente para cada uma das malhas testadas. Nesta tabela estão também mostrados entre parênteses os valores das diferenças percentuais entre os resultados obtidos para a malha em questão e a malha imediatamente mais grosseira. Para malhas menos refinadas o software teve dificuldade em modelar a geometria da chama, assim como a temperatura máxima e o fluxo de calor radiativo. Contudo, conforme a discretização espacial foi refinada, estes parâmetros apresentaram valores que

tenderam a diferenças percentuais de aproximadamente 1%, comparando os resultados numéricos das malhas com $\Delta x = 5$ cm e $\Delta x = 2,5$ cm. Na Figura 4.2 estão comparadas as formas da chama, no mesmo instante de tempo, que resultam da discretização de cada malha utilizada. Observa-se nesta figura que o formato da chama para as malhas mais grosseiras, em especial $\Delta x = 20$ cm, é diferente do formato esperado fisicamente para uma chama.

Tabela 4.1 - Comparação de resultados para diferentes malhas testadas.

	Temperatura máxima (°C)	Altura de chama (m)	Fluxo de calor (W/m ²)
Malha 20 cm	412,3	0,42	886,03
Malha 10 cm	849,63 (51,5%)	0,44 (4,5%)	407,91 (117,2%)
Malha 5 cm	899,85 (5,6%)	0,57 (22,8%)	379,81 (7,4%)
Malha 2,5 cm	913,17 (1,5%)	0,61 (1,7%)	376,57 (0,9%)

Com o aumento do refinamento da malha o erro relativo diminuiu, além de melhorar a forma da chama (conforme Figura 4.2), já que o número de células computacionais é maior e abrangem todo o diâmetro do recipiente de combustível, melhorando assim a resolução do cálculo computacional.

O tempo computacional para cada simulação também é um parâmetro importante. Os tempos computacionais obtidos para a simulação das malhas são de 5620 s (1,6 h), 72362 s (20,1 h), 162162 s (45,04 h) e 535993 s (148,9 h) para as malhas com $\Delta x = 20$ cm, $\Delta x = 10$ cm, $\Delta x = 5$ cm, e $\Delta x = 2,5$ cm, respectivamente.

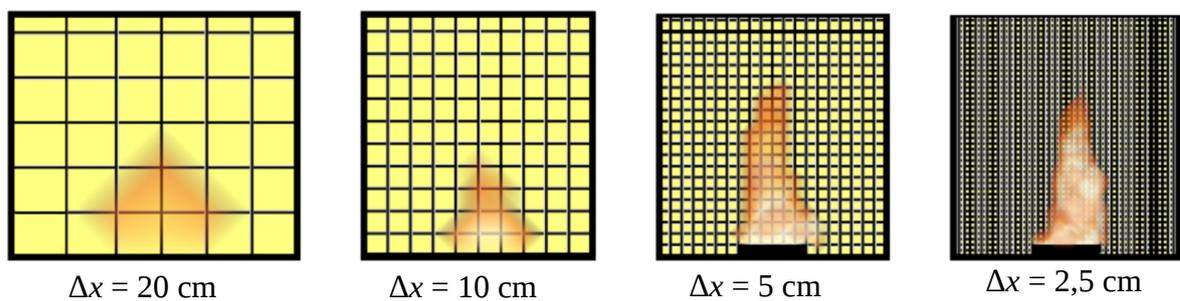


Figura 4.2 - Influência da discretização da malha computacional na forma da chama.

A partir dos resultados apresentados nesta seção, observa-se que as malhas com $\Delta x = 5$ cm e $\Delta x = 2,5$ cm forneceram resultados muito próximos, sendo estas malhas analisadas a seguir usando a metodologia MTR. Para a análise da MTR foi realizada a leitura dos valores das velocidades u , v e w em diversos pontos do domínio computacional, sendo que esses

pontos foram concentrados principalmente nas proximidades da chama do incêndio. Como anteriormente mencionado, este valor deve ser o mais próximo de $MTR < 0,2$, significando assim que pelo menos 80 % dos vórtices estão sendo resolvidos. Para a malha de $\Delta x = 2,5$ cm selecionada, algumas posições são aqui relatadas por se localizarem próximos a chama, na região de influência da chama, ou seja, posições de interesse para a discretização da malha. Na posição de $x = y = 0,0$, variando apenas o valor de z , encontrou-se o valor de $MTR = 0,23$ para $z = 1,0$ m, $MTR = 0,2$ para $z = 2,5$ m. Ao deslocar os pontos de medição para posições mais afastadas do centro do incêndio, como por exemplo em $x = 1,0$ m, $y = 0,0$ m e $z = 1,0$ m, o valor obtido para o $MTR = 0,025$. Assim, os valores obtidos para o MTR podem ser considerados dentro da faixa estabelecida por Pope, 2004. Embora o valor de 0,23 seja acima do valor delimitado, é importante ressaltar que diretrizes gerais para a qualidade de malha em LES não foram estabelecidas até o momento.

4.2 Estudo da discretização do ângulo sólido

Como dito anteriormente, a discretização angular é um parâmetro de suma importância em problemas envolvendo radiação. Essa discretização é feita seguindo o equacionamento mostrado na Seção 2.4.6. Mesmo com o equacionamento já mostrado, é preciso estabelecer a discretização adequada do ângulo sólido que será utilizada no FDS. O valor padrão deste parâmetro é 100 ângulos sólidos discretos (ou “direções ordenadas”, no contexto do método de volumes finitos), porém, esse valor pode não ser o suficiente para a solução da RTE, então por isso diversas discretizações angulares foram testadas. A mesma simulação foi feita para 100, 200, 500, 750, 1000 e 1250 ângulos sólidos discretos, empregando a malha definida na Seção 4.1, assim como os parâmetros do cenário de incêndio de Tu et al., 2013. A distribuição de temperatura para o termopar T_1 pode ser vista na Figura 4.3, e a partir dessa distribuição nota-se que, independentemente do número de ângulos sólidos discretos utilizados, o comportamento da medida de temperatura é aproximadamente o mesmo para todos os casos. A correta discretização angular pode ser definida pela menor variação das medidas para cada caso, o que é visto nos casos com mais de 500 ângulos sólidos discretos. Para os casos de 100 ângulos sólidos discretos, é possível perceber que a oscilação dos resultados é maior que nos demais casos, em se tratando de 250 ângulos sólidos discretos percebe-se que a temperatura sobe rapidamente até 50 s e após isso estabiliza em torno de 60 °C. Em relação à temperatura obtida para 500 ângulos sólidos discretos, a média das diferenças encontradas para 750, 1000 e 1250 ângulos sólidos discretos são respectivamente de 1,18%, 2,19% e 2,62%.

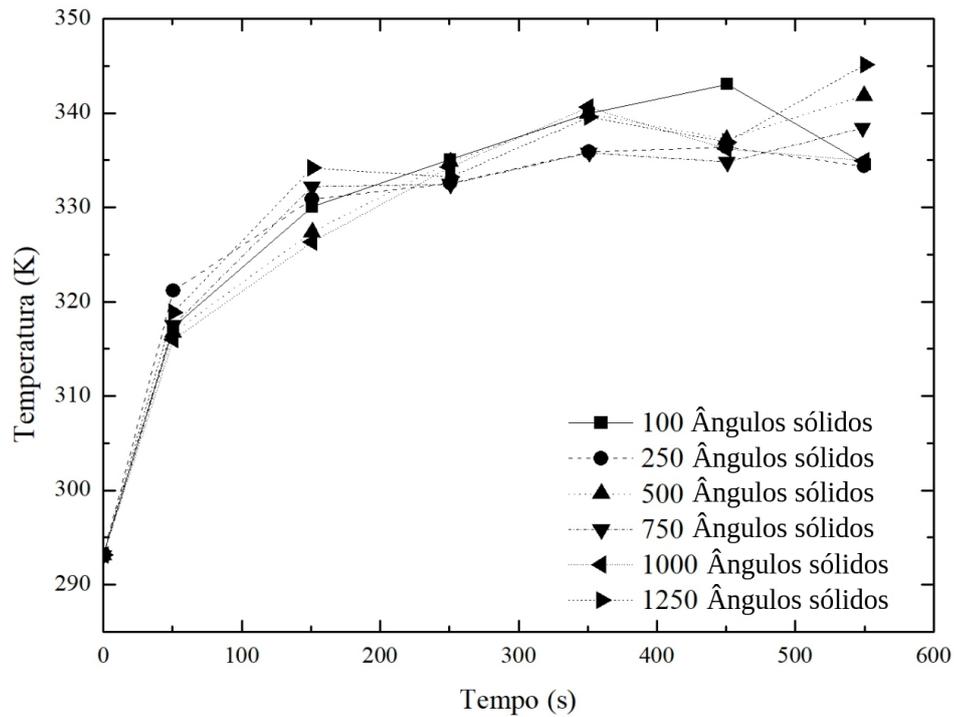


Figura 4.3 - Histórico de temperatura no termopar T_1 para diversas discretizações do ângulo sólido discreto (entre 100 e 1250 ângulos sólidos discretos).

A Figura 4.4 mostra o fluxo de calor radiativo na posição R_1 para diferentes discretizações angulares (entre 100 e 1250 ângulos sólidos discretos). Como pode ser visto nesta figura, conforme se aumenta a quantidade de ângulos sólidos discretos utilizados para resolver o problema, o fluxo de calor radiativo aumenta até certo valor e após isso se mantém praticamente constante. Como aumentar o número de ângulos sólidos discretos significa aumentar a quantidade de RTEs resolvidas, isso provoca um aumento no tempo computacional da simulação. Assim, buscando aliar um resultado confiável com um tempo de simulação aceitável, escolheu-se utilizar 500 ângulos sólidos discretos para todas as simulações. Em relação ao valor do fluxo de calor radiativo obtido para 500 ângulos sólidos discretos, as diferenças encontradas para 750, 1000 e 1250 ângulos sólidos discretos são de 2,75%, 1,75% e 3,5% respectivamente, demonstrando convergência desta análise.

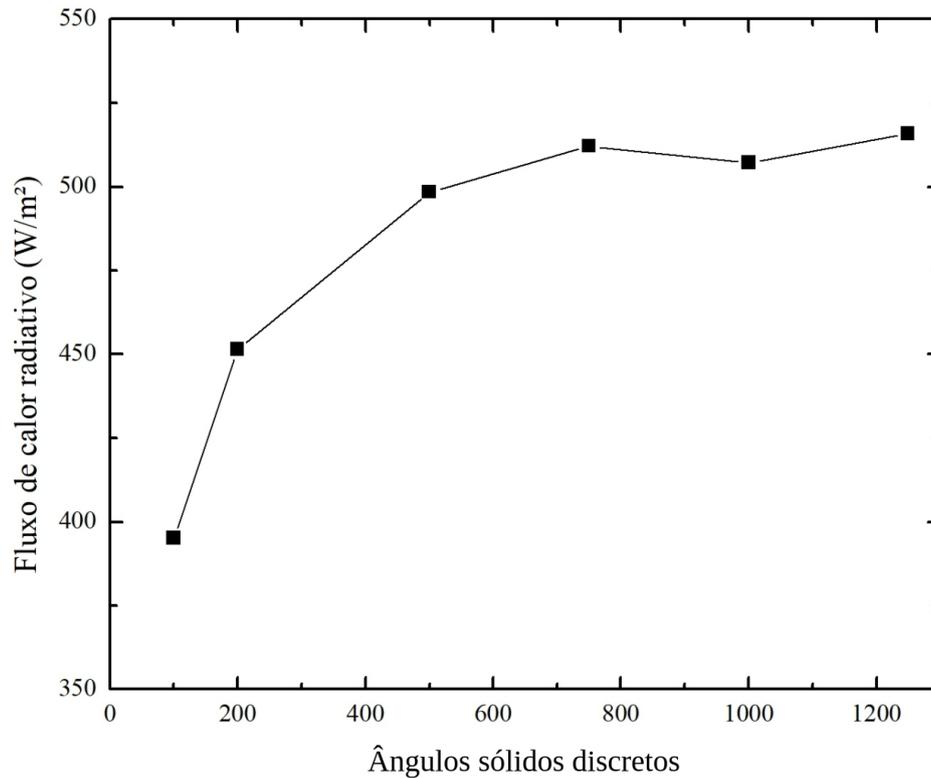


Figura 4.4 - Distribuição do fluxo de calor radiativo para diferentes ângulos sólidos discretos.

4.3 Comparação com resultados da literatura

A comparação entre o resultado de temperatura no termopar T_1 obtida pela simulação computacional com o dado experimental obtido por Tu et al., 2013, é feita através do cálculo do desvio percentual entre estes valores no instante de tempo de 200 s. Assim, os desvios percentuais calculados para todas as malhas (Malha 1 de $\Delta x = 20$ cm, Malha 2 de $\Delta x = 10$ cm, Malha 3 de $\Delta x = 5$ cm e Malha 4 de $\Delta x = 2,5$ cm) foram de 406,07 % para a Malha 1, 20,5 % para a Malha 2, 22,85 % para a Malha 3 e 18,85 % para a Malha 4.

Com a utilização da malha de 2,5 cm em cada direção e 500 ângulos sólidos discretos o resultado para a distribuição temporal da temperatura do termopar T_1 pode ser vista na Figura 4.5. É possível notar que os resultados simulados apresentam o mesmo comportamento e têm boa concordância tanto para os dados experimentais quanto para as simulações. A máxima diferença encontrada entre os valores simulados e experimental, neste caso, fica em torno de 16%, sendo este um valor aceitável, tendo em vista que o objetivo deste trabalho é a análise

do fluxo de calor radiativo. A diferença de 16 % e 18,85 % para as simulações da malha de $\Delta x = 2,5$ cm pode ser atribuída à variação temporal da simulação entre uma simulação e outra.

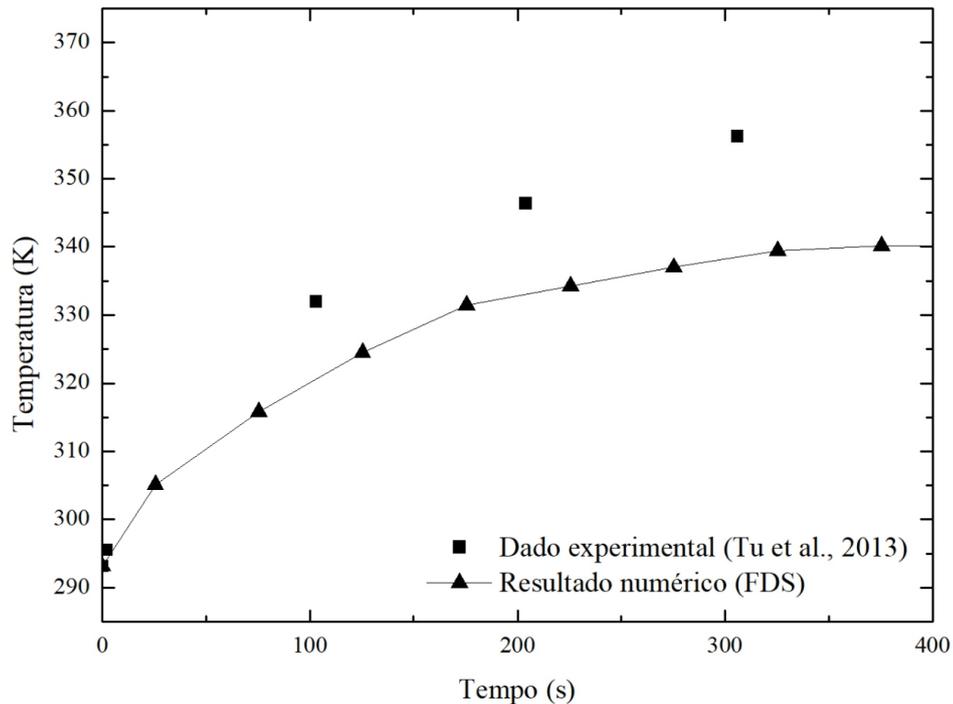


Figura 4.5 - Comparação do histórico de temperatura do termopar T_1 : resultado numérico do presente trabalho \times dados experimentais de Tu et al., 2013.

A fim de se fazer a comparação correta entre os resultados obtidos com a simulação e os resultados apresentados por Tu et al., 2013, primeiramente é necessário estabelecer um intervalo de tempo para a análise dos dados simulados. Esse intervalo de tempo usado como referência pode ser visto na Figura 4.6, onde é mostrado como se desenvolve o fluxo de calor radiativo ao longo do tempo da simulação. Na faixa de tempo entre 100 e 550 segundos pode-se considerar que o problema está em regime médio permanente e por isso essa faixa de tempo foi escolhida para o cálculo dos resultados. Este método foi utilizado para o cálculo dos fluxos de calor radiativo dos radiômetros R_1 e R_2 .

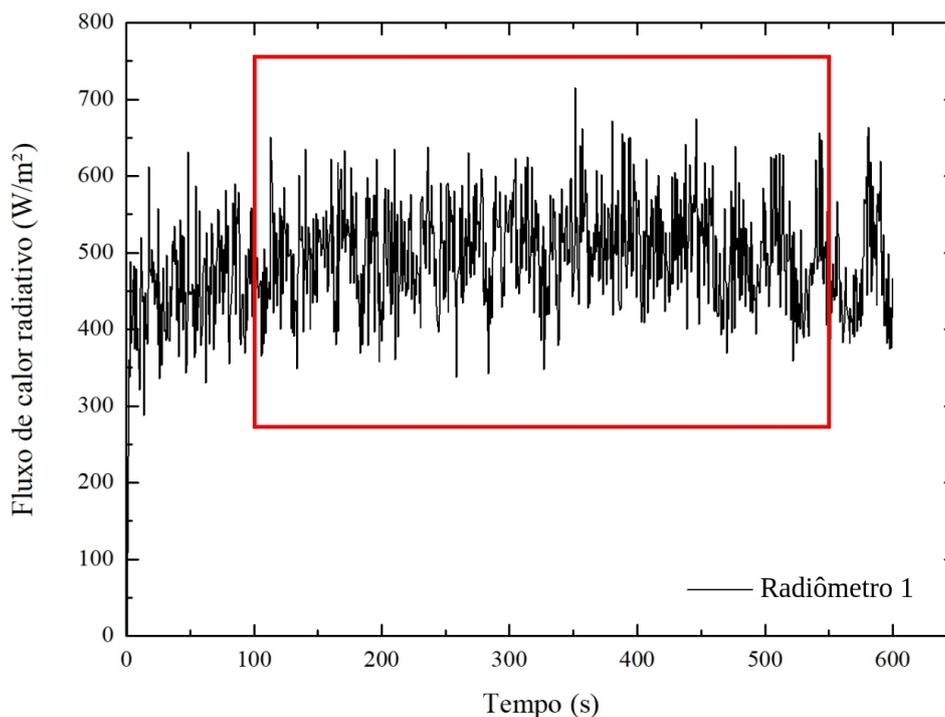


Figura 4.6 - Exemplo do intervalo de tempo aproximado em regime médio permanente para o cálculo dos resultados.

A Tabela 4.2 apresenta a temperatura máxima, altura de chama e fluxos de calor radiativo em R_1 e R_2 , obtidos no presente trabalho com o FDS e aqueles obtidos experimentalmente por Tu et al., 2013. Os resultados mostrados na Tabela 4.2 são de maior importância para este estudo devido ao fato de que todos, de alguma maneira, relacionam-se com a radiação emitida pelo incêndio. Para todos os parâmetros foram encontrados bons resultados, todos com erros relativos menores que 10%. A temperatura máxima foi determinada através da maior temperatura medida pelos termopares presentes na simulação, o fato da máxima temperatura encontrada ser um pouco maior que o valor experimental de referência pode estar relacionado com a forma que o software define o combustível e o processo de combustão, possuindo algum parâmetro, como por exemplo o calor específico, com alguma diferença em comparação ao parâmetro real. A altura de chama foi determinada pelo método de Zukoski et al., 1985, e apresenta alta dependência da discretização da malha utilizada na simulação (como mostrado na Figura 4.2). Quanto mais volumes de controle existirem dentro do espaço geométrico da chama, mais correto será o valor da sua altura obtido na simulação. Analisando os desvios encontrados para a altura de chama confirma-se,

definitivamente, que a discretização adotada para a malha está adequada. Para esta dissertação o resultado mais importante é o fluxo de calor radiativo emitido pela chama. Este parâmetro depende diretamente da temperatura da chama e da altura da mesma, assim como da composição do meio, então a boa concordância da temperatura da chama e da altura da chama em relação aos dados experimentais contribui para a concordância dos fluxos de calor radiativos. O fluxo de calor radiativo calculado no FDS também depende diretamente da quantidade de ângulos sólidos discretos empregada. Assim se pode corroborar que a utilização de 500 ângulos sólidos discretos está adequada com o problema estudado. Como já esperado do modelo de gás cinza padrão utilizado pelo software, os resultados obtidos para a simulação superestimaram os valores experimentais.

Tabela 4.2 - Comparação de máxima temperatura, altura de chama e fluxos de calor radiativo em R₁ e R₂: resultados numéricos do FDS × dados experimentais de Tu et al., 2013.

	Máxima	Altura de chama	Fluxo de calor radiativo (W/m ²)	
	temperatura (K)	(m)	Radiômetro R ₁	Radiômetro R ₂
Dados experimentais de Tu et al. (2013)	1089,0	0,63	473,1	473,8
Resultados numéricos do FDS	1128,9	0,65	498,7	515,0
Desvios médios (%)	3,66	3,17	5,4	8,7

4.4 Verificação dos modelos de gás cinza

A verificação do código computacional implementado para o cálculo do coeficiente de absorção local pelos diferentes modelos de gás cinza foi feita através da solução matemática do equacionamento a partir de dados obtidos do FDS. Primeiramente se adicionou o equacionamento do GC₂ no código fonte do FDS e para se verificar se a implementação do código computacional foi corretamente realizada simulou-se o caso utilizado para a validação [Tu et al., 2013]. Realizou-se a simulação e, em vários instantes de tempo, com os valores das frações mássicas de CO₂ e H₂O, juntamente com a temperatura reportada em cada instante de tempo, as Equações 2.73, 2.74 e 2.75 foram resolvidas para cada instante de tempo. Quando os resultados obtidos para a solução numérica das equações se igualaram àqueles reportados pelo FDS, considerou-se que a implementação do código computacional estava correta.

Para o caso do GC₃ o mesmo procedimento foi adotado, porém nesta etapa as equações, a partir da Equação 2.76 até a Equação 2.84, foram resolvidas. Comparando-se os dados

obtidos na solução numérica com os dados reportados pelo FDS já alterado foi possível concluir que a implementação do código foi realizada corretamente.

No modelo de gás cinza o principal parâmetro é o coeficiente de absorção. Assim, como em cada um dos modelos de gás cinza utilizados, o coeficiente de absorção é calculado de uma forma diferente, comparou-se os coeficientes de absorção a fim de analisar as diferenças entre eles. A Figura 4.7 apresenta os coeficientes de absorção para cada modelo de gás cinza utilizado, no tempo $t = 200$ s para o caso de Lin et al., 2010, e pode-se perceber que o cálculo do coeficiente de absorção, diferente para cada modelo, resultou em diferentes valores.

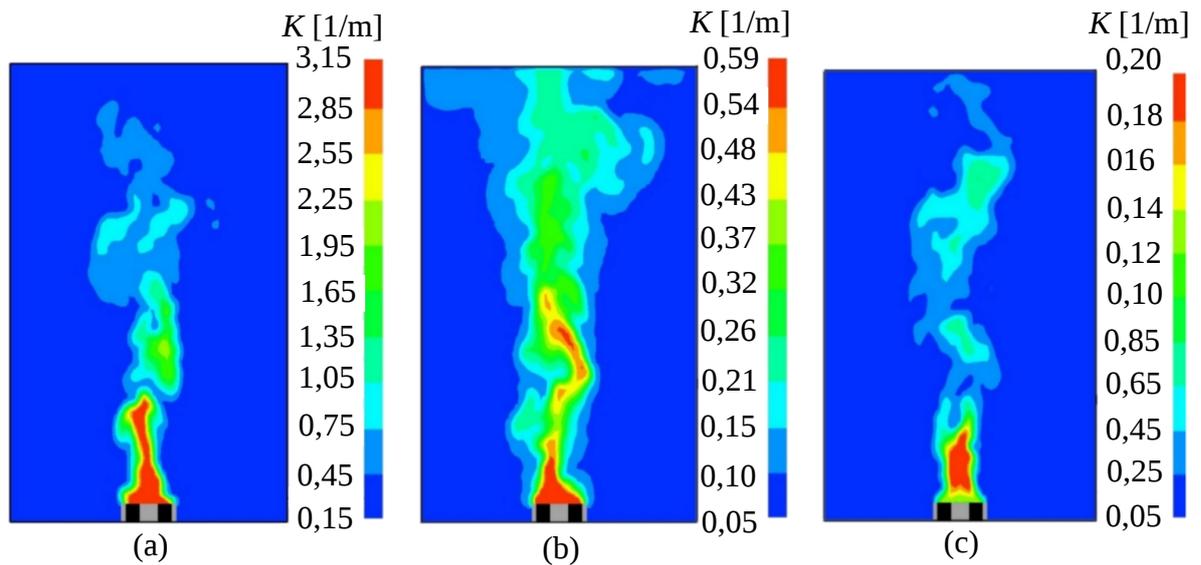


Figura 4.7 - Coeficientes de absorção obtidos para cada modelo de gás cinza implementado, no tempo $t = 200$ s para o caso de Lin et al., 2010: (a) GC₂, (b) GC₁ e (c) GC₃.

5 RESULTADOS

Neste capítulo, são apresentados os resultados obtidos nesta dissertação a partir das simulações para os modelos de gás cinza apresentados nos capítulos anteriores. Este capítulo está dividido em três partes. Na primeira serão apresentados os resultados obtidos para o caso de Tu et al., 2013, enquanto na segunda e na terceira partes serão apresentados os resultados obtidos para os casos de Lin et al., 2010, e Sahu et al., 2015, respectivamente. Em todos os casos serão apresentados os resultados para o modelo de gás cinza padrão do FDS (GC_1), o modelo de gás cinza de Cassol et al., 2015, (GC_2) e para o modelo de gás cinza calculado a partir do modelo WSGG de Cassol et al., 2014, (GC_3). Ainda, em se tratando dos resultados de cada caso, optou-se por realizar duas vezes cada simulação para verificar a influência da fuligem em cada caso. Em cada caso uma simulação foi realizada considerando a combustão completa, onde não há a formação de fuligem, e no outro caso é considerado que existe formação de fuligem, que seria proveniente da combustão incompleta do combustível a fim de observar a influência da fuligem nos modelos de gás cinza utilizados.

5.1 Resultados obtidos para o caso 1 – Tu et al., 2013

Na Figura 5.1(a), 5.1(b) e 5.1(c) estão representados os campos de temperatura, fração molar de CO_2 e fração molar de H_2O para as simulações desconsiderando a formação de fuligem, empregando o modelo de gás cinza GC_1 . As diferenças nestes campos em relação aos mesmos campos obtidos com os modelos GC_2 e GC_3 não são perceptíveis no espaço bidimensional, assim serão demonstrados apenas os campos obtidos ao utilizar o modelo GC_1 . Os campos mostrados foram obtidos em diversos instantes de tempo, dentro do intervalo de regime médio permanente, a fim de mostrar as diferenças temporais que ocorrem ao utilizar a metodologia LES e também para demonstrar a evolução temporal da simulação. Os campos são posicionados no plano x - z que passa pelo centro da poça e pelo centro de todo o domínio computacional (uma vez que o domínio possui 10 m de largura, os campos mostrados na Figura 5.1 mostram somente a região próxima a poça). O centro da poça está localizado no centro do domínio, na posição $x = y = 0$ e $z = 0,009$ m. Pode-se observar a partir da Figura 5.1 que a chama formada neste incêndio tem alinhamento vertical, pois, em decorrência da sala do domínio ser fechada, não existe circulação de correntes de ar provindas do ambiente externo, assim a chama se forma verticalmente. Os campos de frações molares de CO_2 , H_2O e o campo de temperatura, apresentam os máximos valores na região acima da poça de combustível, dentro da chama.

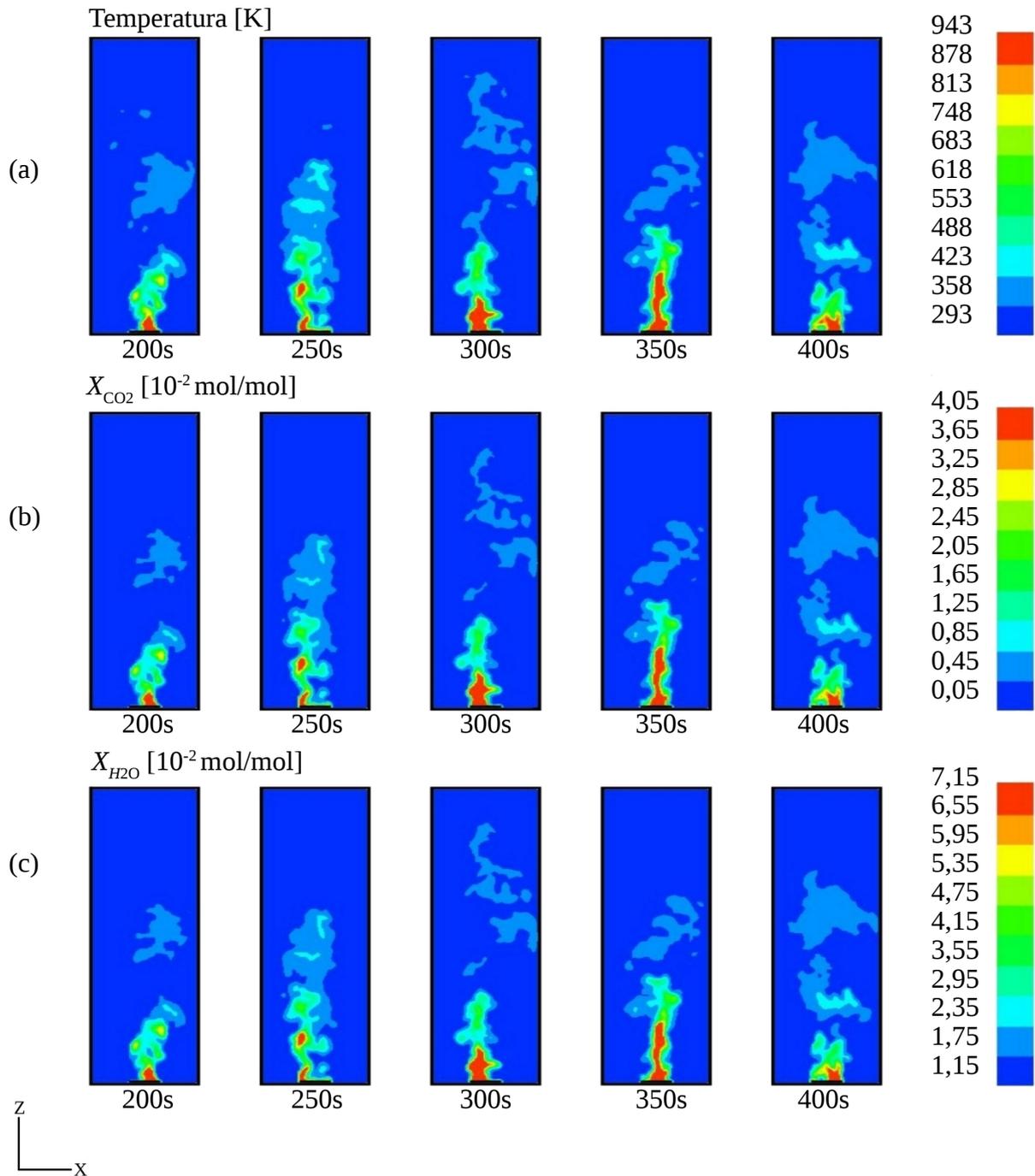
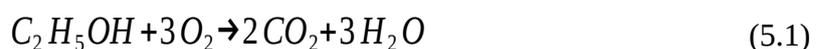


Figura 5.1 - Campos no plano central da poça do caso 1, em diversos instantes de tempo, para as simulações sem fuligem utilizando o modelo GC_1 : (a) temperatura, (b) fração molar de CO_2 e (c) fração molar de H_2O .

As Figuras 5.2(a) e 5.2(b) apresentam os valores de temperatura e de frações molares de CO_2 e de H_2O ao longo da linha de centro da poça, ou seja, ao longo do eixo z mantendo os valores dos eixos x e y constantes e igual a 0. Tendo em vista que a metodologia LES,

empregada nesta pesquisa, fornece resultados que apresentam variação temporal em cada instante de tempo, os resultados para cada um dos parâmetros de interesse (temperatura, fração molar de CO₂ e fração molar de H₂O) são calculados pela média em todo o regime médio permanente anteriormente apresentado (180 s a 530 s). Dessa forma, os valores de temperatura e de frações molares estão apresentados a partir do centro da chama de modo que se obtiveram as medidas em relação à altura do eixo z. Assim, são apresentados, na Figura 5.2(a) e 5.2(b), os valores de temperatura e frações molares de CO₂ e de H₂O para os diferentes modelos de gás cinza estudados (GC₁, GC₂ e GC₃). Observando os resultados obtidos para a distribuição de temperatura, na Figura 5.2(a), ao longo do eixo z percebe-se que os valores reportados apresentam boa concordância com os resultados reportado por Fischer et al., 1987, em seu estudo. O pico de temperatura mostrado pela figura também é explicado porque no experimento e nas simulações a altura da poça de combustível é de apenas 1,4 cm e altura da chama é de 42 cm, logo as máximas temperaturas são encontradas em regiões internas da chama, as quais estão localizadas em pequenos valores do eixo z. Ainda em se tratando dos valores de temperaturas apresentados na Figura 5.2(a), o valor máximo está em torno de 970 K o qual é próximo ao valor obtido por Tu et al., 2013, no experimento de referência, que é de 1086 K. Essa diferença em relação à referência pode ser explicada pelo fato de que o valor apresentado na Figura 5.2(a) é o valor máximo obtido no eixo vertical em determinado instante de tempo e este pode ser diferente do máximo global obtido pela referência. Analogamente, a Figura 5.2(b) apresenta a distribuição da fração molar de CO₂ e de H₂O ao longo da linha de centro da chama para a média calculada no regime médio permanente. Pode-se observar que as simulações apresentaram uma boa concordância com os valores da literatura, sendo obtido um valor de aproximadamente 1,75 para a razão entre os máximos valores de x_{H_2O} e x_{CO_2} . Ao considerar completa a reação de combustão do etanol, representada pela Equação 5.1, a razão entre os coeficientes estequiométricos H₂O/CO₂ é de 1,5. Este parâmetro, a razão estequiométrica de H₂O/CO₂, também é importante neste trabalho porque a partir dela selecionou-se o modelo WSGG aqui empregado. O modelo WSGG utilizado neste trabalho foi o de Cassol et al., 2014, uma vez que este modelo estabelece correlações do modelo WSGG que são independentes da razão das frações molares entre H₂O e CO₂ (o que é o caso no presente trabalho, onde se tem um campo não homogêneo de H₂O e CO₂, com razões variáveis x_{H_2O}/x_{CO_2} ao longo do domínio), diferentemente do modelo WSGG de Dorigon et al., 2013, que estabelece as correlações do modelo WSGG para razões fixas $x_{H_2O}/x_{CO_2} = 1$ ou $x_{H_2O}/x_{CO_2} = 2$.



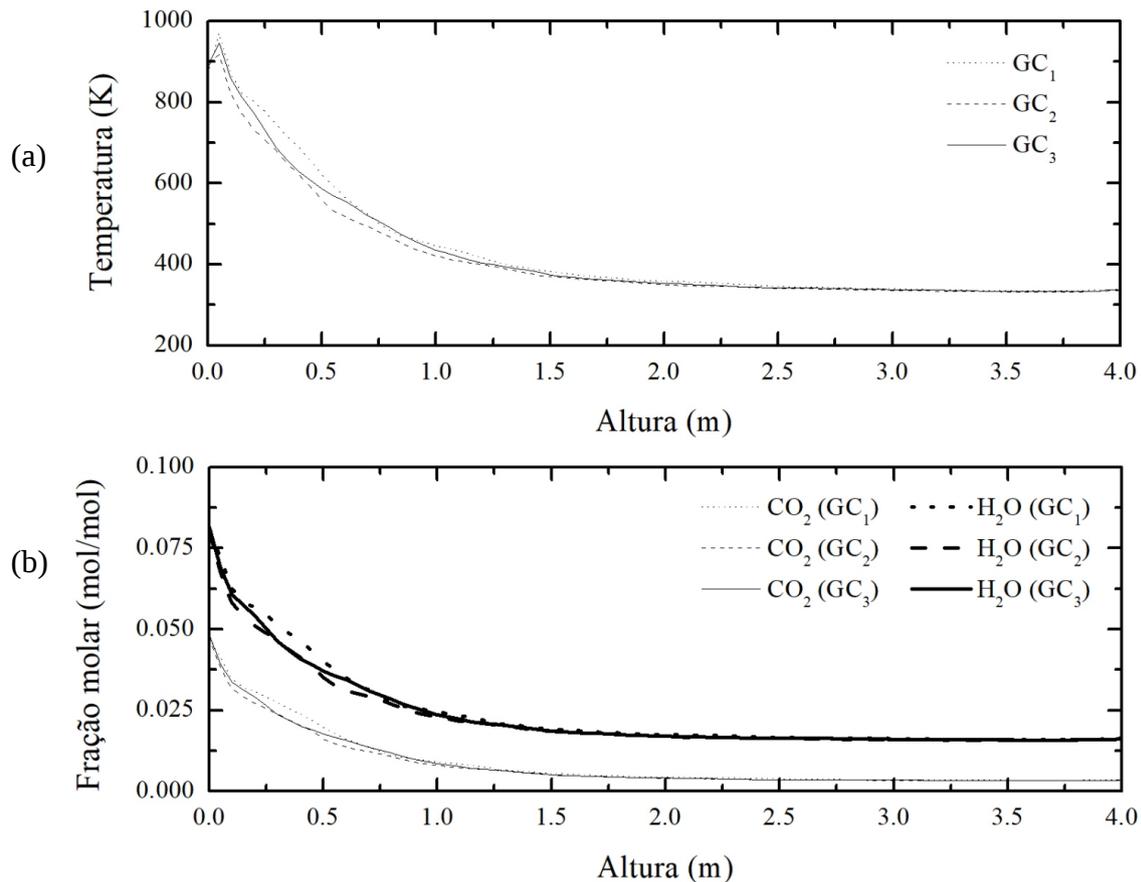


Figura 5.2 - Perfis ao longo da linha de centro da poça para as simulações sem fuligem do caso 1, para os diversos modelos de gás cinza, no intervalo de tempo de 180 s até 530 s: (a) temperatura e (b) frações molares de CO₂ e H₂O.

Analogamente à Figura 5.1, a Figura 5.3 apresenta os campos de temperatura, fração molar de CO₂ e de H₂O, acrescida agora do campo de fuligem que antes não foi considerado na simulação, assim se pode comparar o efeito da fuligem entre os casos. Percebe-se que existe uma variação da temperatura na chama e que não existem variações nas concentrações de produtos quando comparadas ao caso sem fuligem. A dinâmica do incêndio não se altera, a chama mantém-se vertical com as concentrações de produtos localizados na chama e nas suas proximidades. Do mesmo modo que para o caso sem fuligem, todos os parâmetros de interesse foram obtidos através da média dos valores de cada parâmetro em todo o intervalo de tempo do regime médio permanente. Analisando a Figura 5.3(a) observa-se que existe uma redução do pico de temperatura da chama, como era esperado e de acordo com a literatura, já que estes pontos se encontram em regiões onde existe concentração de fuligem, porém, em regiões sem concentrações de fuligem a temperatura mantém-se com valores próximos aos

valores encontrados para o caso sem fuligem. Já para os campos de CO_2 e H_2O é possível perceber que não existe variação entre o caso sem fuligem e o caso com fuligem. Isso pode ocorrer devido ao fato de que o etanol é um combustível que produz pouca fuligem e assim, a influência da fuligem nas frações molares de CO_2 e H_2O pode ser desconsiderada. Em todos os casos a região logo acima da poça, onde se encontra a chama, apresenta maior concentração de produtos da combustão, tais como H_2O , CO_2 e fuligem, além de maior temperatura local.

Na análise dos campos quando se considera a combustão completa, quando não há fuligem, e para quando se considera a combustão incompleta, quando há fuligem, espera-se encontrar resultados similares porque o etanol é um combustível que não produz muita fuligem. Espera-se que o comportamento do perfil de temperatura quando a combustão é incompleta seja similar ao perfil de temperatura do caso em que a combustão é completa, porém, com uma redução nos valores máximos porque a fuligem é um meio que, assim como o CO_2 e o H_2O , influencia na troca radiante, aumentando o termo fonte radiativo, assim diminuindo a temperatura no local onde há concentração de fuligem, o que pode ser visto na Figura 5.4(a). Em relação às frações molares de CO_2 e de H_2O , em casos com fuligem, inicialmente se espera que essas quantidades se mantenham iguais como pode ser visto nas Figura 5.4(b). A Figura 5.4(c) demonstra os valores obtidos para as frações volumétricas de fuligem para todos os modelos de gás cinza estudados. Os pequenos valores obtidos para a fração volumétrica de fuligem, menores que 0,15 ppm, corroboram a ideia de que o etanol é um combustível que produz pouca fuligem. Os valores obtidos são pequenos e não exercem grande influência nos resultados da simulação quando comparados ao caso sem fuligem, esses pequenos valores vão ao encontro aos obtidos em diferentes estudos [Khosousi et al., 2015; Frenzel et al., 2017; Liu et al., 2017].

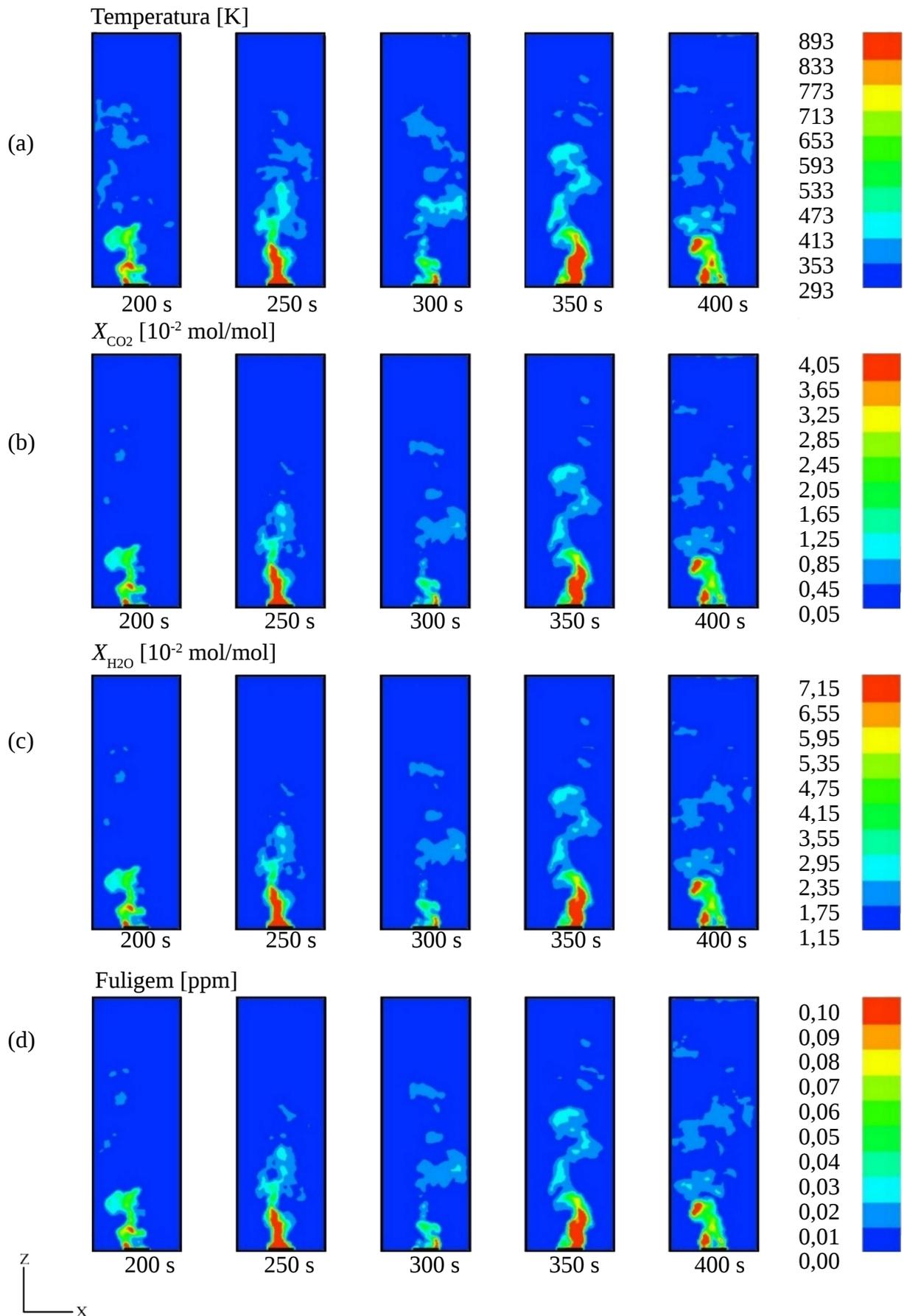


Figura 5.3 - Campos no plano central da poça, em diversos instantes de tempos, para as simulações sem fuligem do caso 1, utilizando o modelo GC_1 : (a) temperatura, (b) fração molar de CO_2 e (c) fração molar de H_2O e (d) fração volumétrica de fuligem.

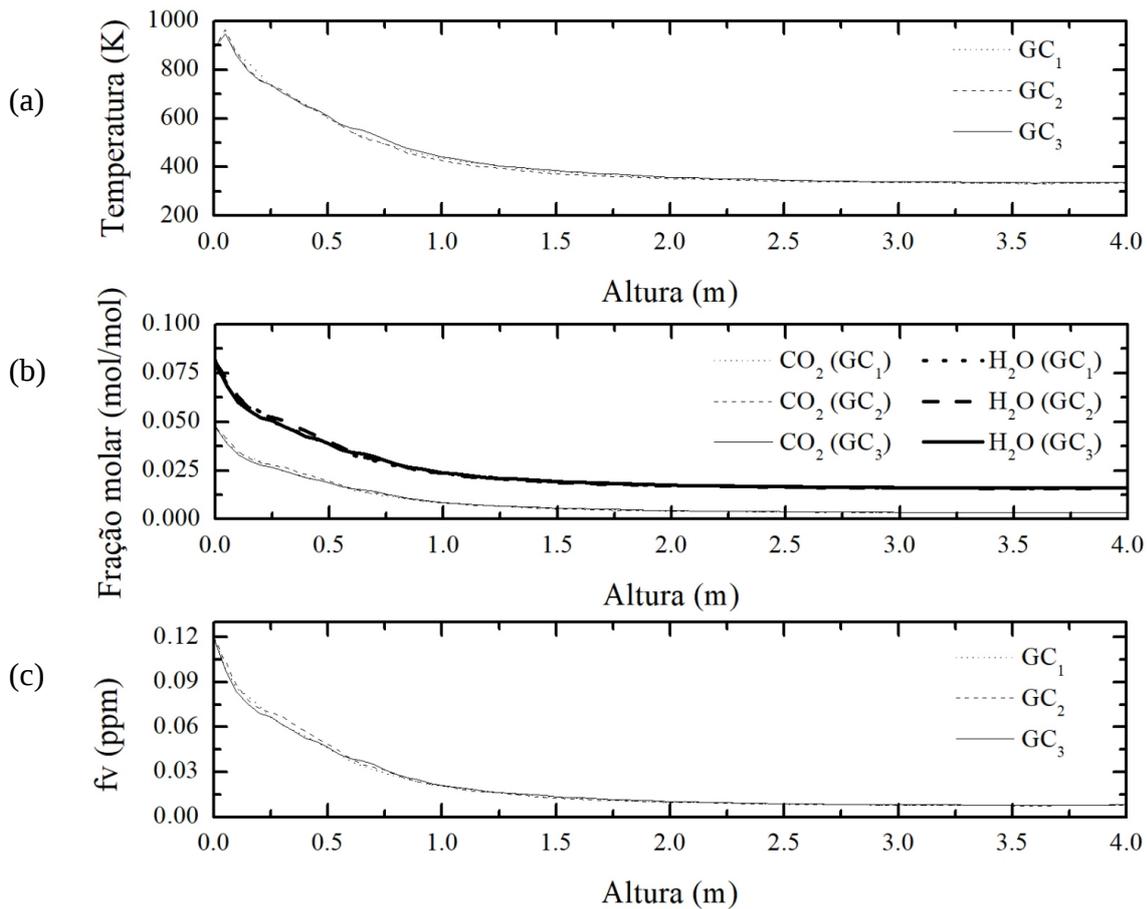


Figura 5.4 - Perfis ao longo da linha de centro da poça para as simulações com fuligem do caso 1, para diversos modelos de gás cinza, no intervalo de tempo entre 180 s e 530 s: (a) temperatura, (b) frações molares de CO₂ e H₂O e (c) fração volumétrica de fuligem.

O principal objetivo deste trabalho é analisar os fluxos de calor radiativos preditos por cada um dos modelos de gás cinza adotados (GC_1 , GC_2 e GC_3). Para isto se compararam os valores dos fluxos de calor preditos pelas simulações com os valores obtidos por Tu et al., 2013. As posições utilizadas para analisar os fluxos de calor são as mesmas em relação àquelas utilizadas na referência. Neste caso dois radiômetros numéricos foram inseridos no domínio computacional a uma distância de 1,5 m do centro da poça de combustível para medir o fluxo de calor radiativo da chama. Realizou-se uma simulação para cada modelo de gás cinza, considerando ainda simulações com e sem a formação de fuligem. Em cada um dos seis casos analisaram-se os resultados médios do fluxo de calor radiativo adotando a mesma abordagem que foi citada anteriormente. Selecionou-se um intervalo de tempo, mostrado na Figura 4.6, onde é possível considerar que o problema tem um comportamento semelhante a um problema em regime permanente, isto é, onde as médias dos parâmetros de interesse não variam com o tempo. Neste caso, o intervalo de tempo que satisfaz essa condição é entre 100

e 550 s, porém, o intervalo adotado é entre 180 e 530 s para manter o mesmo intervalo utilizado por Tu et al., 2013, em seus experimentos. Os resultados do fluxo de calor radiativo foram calculados através de uma média temporal entre todos os valores contidos dentro do intervalo de regime permanente e são comparados com os dados experimentais.

A Tabela 5.1 apresenta os resultados obtidos para todos os modelos de gás cinza utilizados no presente trabalho, considerando ou não a presença de fuligem no problema, bem como os desvios percentuais para o fluxo de calor radiativo em relação ao valor experimental. É possível perceber que todos os modelos de gás cinza fornecem resultados que seguem o mesmo comportamento dos dados experimentais, sendo que a simulação utilizando o modelo GC₂ apresentou os resultados mais discrepantes em relação aos resultados experimentais, com um desvio percentual médio de 14,9% para as simulações que consideram a existência de fuligem no problema, enquanto isso o modelos GC₃ apresentou um desvio percentual médio de 9,3% e o GC₁ apresentou um desvio de 7,3%. Assim, considerando que o desvio percentual deve ser compatível com aplicações em problemas de engenharia, adota-se como limite o máximo de 10% de desvio. Com este limite percentual, a utilização dos modelos de gás cinza GC₁ e GC₃ poderia ser recomendada em problemas de engenharia, embora o desvio percentual do GC₃ para o radiômetro R₂ tenha sido um pouco superior ao limite estabelecido.

Tendo em vista que os valores medidos pelos radiômetros aumentam praticamente na mesma proporção para todos os modelos de gás cinza, ao se comparar os fluxos de calor radiativo para as simulações com e sem fuligem, pode-se considerar que o aumento dos valores ocorreu pelo fato de agora existir fuligem no problema. Entretanto, observa-se que os resultados considerando ou não a fuligem nas simulações apresentaram pouca diferença, sendo possível inferir que o fluxo de calor radiativo é dominado pela emissão de radiação proveniente do meio gasoso (H₂O e CO₂), e não da fuligem, em concordância com o estudo experimental de Suo-Anttila et al., 2009, para poças de etanol. Em relação ao modelo GC₂, observa-se que o fluxo de calor radiativo obtido com este modelo foi menor do que o valor experimental; este comportamento difere do esperado, pois se espera que o modelo de gás cinza sobre-estime o fluxo de calor radiativo. Com a presença de fuligem neste caso, o modelo GC₂ apresentou significativa melhora nos seus resultados, uma vez que os fluxos de calor radiativo aumentaram e se aproximaram do valor experimental. Por outro lado, os outros modelos, GC₁ e GC₃, por terem sobre-estimado os fluxos, ao incluir a fuligem nas simulações, os fluxos foram ainda maiores e se afastaram no valor experimental. No entanto, observa-se que o resultado obtido na posição referente ao radiômetro R₂ para o modelo GC₁ reduziu o desvio ao incluir fuligem nos cálculos; este comportamento é diferente dos demais modelos e também

difere do comportamento típico do fluxo de calor radiativo em simulações com fuligem, o qual é usualmente maior do que em simulações sem fuligem.

Tabela 5.1 - Fluxos de calor radiativo obtido para os diferentes modelos de gás cinza utilizados junto com os seus respectivos desvios percentuais.

	Radiômetro 1 (W/m ²)	Desvio %	Radiômetro 2 (W/m ²)	Desvio %
Combustão completa (sem fuligem)				
Tu et al., 2013	473,1	-	473,8	-
GC ₁	498,7	5,4	515,0	8,7
GC ₂	372,3	21,3	375,7	20,7
GC ₃	500,4	5,8	510,2	7,7
Combustão incompleta (com fuligem)				
Tu et al., 2013	473,1	-	473,8	-
GC ₁	505,8	6,9	510,2	7,7
GC ₂	400,1	15,4	405,8	14,4
GC ₃	510,3	7,9	525,1	10,8

5.2 Resultados obtidos para o caso 2 – Lin et al., 2010

Na Figura 5.5(a), 5.5(b) e 5.5(c) estão representados os campos de temperatura, fração molar de CO₂ e fração molar de H₂O respectivamente, para as simulações desconsiderando a formação de fuligem, empregando o modelo de gás cinza GC₃. Como no caso anterior, as diferenças nestes campos em relação aos mesmos campos obtidos com os modelos GC₁ e GC₂ não são perceptíveis no espaço bidimensional, assim são mostrados somente os campos obtidos ao utilizar o modelo GC₃. Os campos mostrados foram obtidos em diversos instantes de tempo, dentro do intervalo de regime médio permanente, de 100 s até 300 s para este caso, a fim de demonstrar a evolução temporal do presente caso. Assim como no caso anterior, a poça encontra-se no centro do domínio, na posição $x = y = 0$ e $z = 0,05$ m. Neste caso o domínio apresentado na Figura 5.5 é do tamanho real àquele da simulação, diferentemente do caso anterior. Estes campos estão posicionados no plano x - z que passa pelo centro da poça. Observa-se que neste caso a chama novamente é vertical, uma vez que neste caso é considerada a queima em poça em ambiente aberto, porém sem correntes de ar. Assim, os campos de temperatura e de frações molares de CO₂ e de H₂O apresentam seus maiores valores na região da chama e nas regiões próximas da chama. Tendo em vista que o domínio é aberto observa-se que não existe o acúmulo de produtos da combustão no ambiente, o que

pode ser visto em todos os instantes de tempo e para os diferentes campos representados na Figura 5.5. A representação dos campos em diferentes instantes de tempo possibilita perceber a diferença temporal na simulação, em cada instante de tempo o campo é diferente daquele do instante anterior.

Para melhor avaliar os resultados, realizou-se a distribuição de temperatura na linha de centro da poça, ou seja, ao longo do eixo z do domínio mantendo os valores dos eixos x e y iguais a 0. A distribuição de cada parâmetro foi obtido através do cálculo da média dos valores no intervalo de regime médio permanente (100 s até 300 s), ou seja, os valores de temperatura estão mostrados a partir do piso da sala, passando pelo centro da chama até o limite superior do domínio, de modo que se obtiveram as medidas de temperatura em relação à altura do eixo z no centro da poça e do domínio. A Figura 5.6(a) apresenta os resultados de temperatura para as simulações desconsiderando a formação de fuligem, empregando os modelos de gás cinza em estudo (GC_1 , GC_2 e GC_3). Analisando esta distribuição de temperatura percebe-se que os valores obtidos são próximos àqueles obtidos por Choi et al., 1994, que obteve valores próximos a 1350 K em seu estudo experimental em chamas tipo poça de n-heptano. Analogamente, a Figura 5.6(b) apresenta a distribuição de fração molar de CO_2 e de H_2O ao longo da linha de centro da chama, através da média dessas concentrações no regime médio permanente. Obteve-se uma boa concordância com os valores da literatura, sendo obtido um valor próximo de 1,24 para a razão entre os máximos valores de x_{H_2O} e x_{CO_2} . Considerando a reação de combustão completa do n-heptano, representada pela Equação 5.2, a razão entre os coeficientes estequiométricos do H_2O e do CO_2 é de 1,14, sendo este parâmetro empregado como indicativo na seleção do modelo WSGG que foi utilizado neste trabalho (WSGG de Cassol et al. (2014), ajustado para razões variáveis x_{H_2O}/x_{CO_2}).



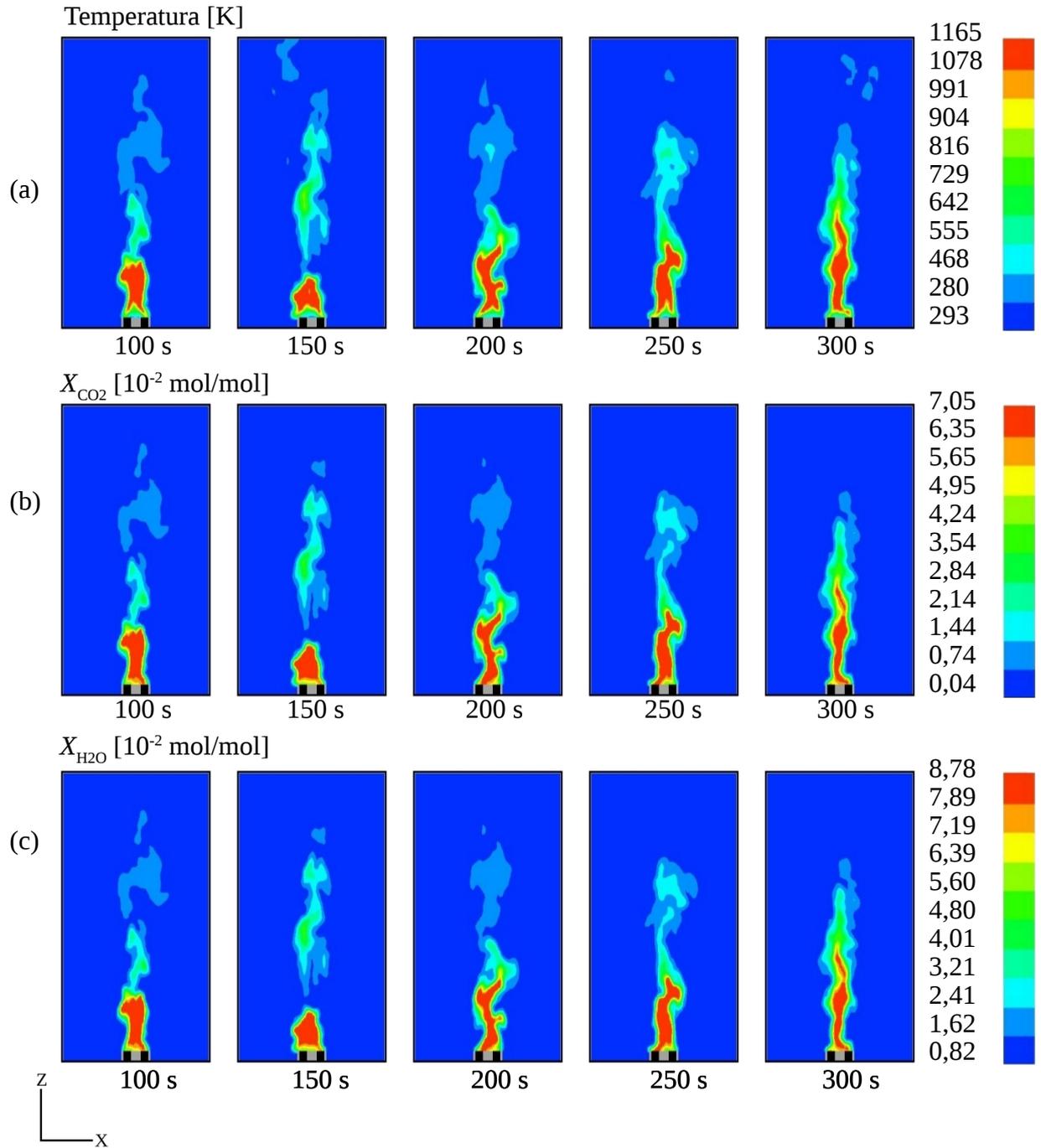


Figura 5.5 - Campos no plano central da poça, em diversos tempos, para as simulações sem fuligem do caso 2, utilizando o modelo GC₃: (a) temperatura, (b) fração molar de CO₂ e (c) fração molar de H₂O.

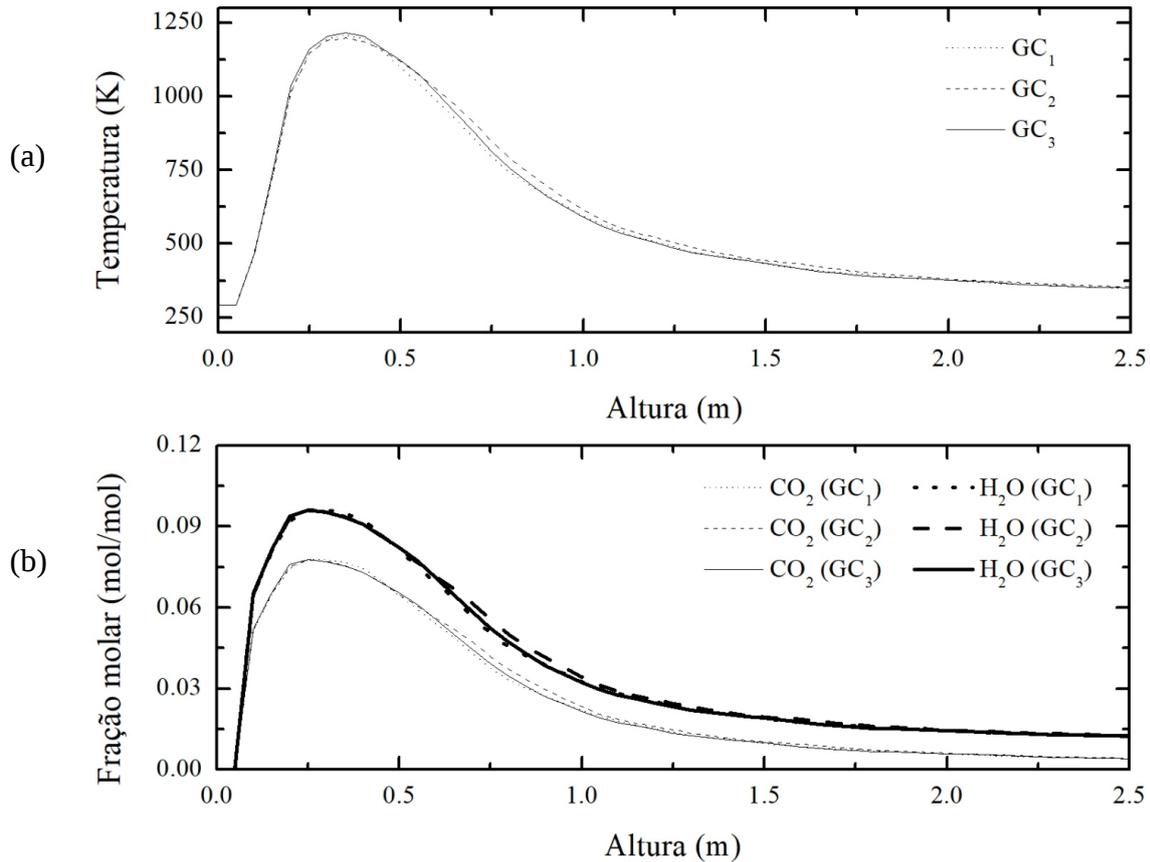


Figura 5.6 - Perfis ao longo da linha de centro da poça para as simulações sem fuligem do caso 2, para os diversos modelos de gás cinza, no intervalo de tempo de 100 s a 300 s: (a) distribuição de temperatura e (b) distribuição das frações molares de CO₂ e H₂O.

Do mesmo modo que a Figura 5.5 foi construída, a Figura 5.7 reporta os campos de temperatura, frações molares de CO₂ e H₂O, e adiciona a fuligem que antes não foi considerada nos cálculos. Pode-se perceber que a temperatura teve uma redução no valor de pico e também nas regiões onde há concentração de fuligem, como esperado, já nas regiões sem fuligem a temperatura se manteve similar quando comparada ao caso sem fuligem. As variações no tamanho e forma da chama mostrados nas Figuras 5.5 e Figura 5.7 podem ser decorrentes da variação temporal da simulação e por isso se optou por representar os campos de temperatura, concentrações molares de CO₂, H₂O e fração volumétrica de fuligem em diversos instantes de tempo para observar o comportamento das quantidades de interesse e assim poder comparar esses campos com os campos da simulação em que a fuligem não era considerada (Figura 5.5).

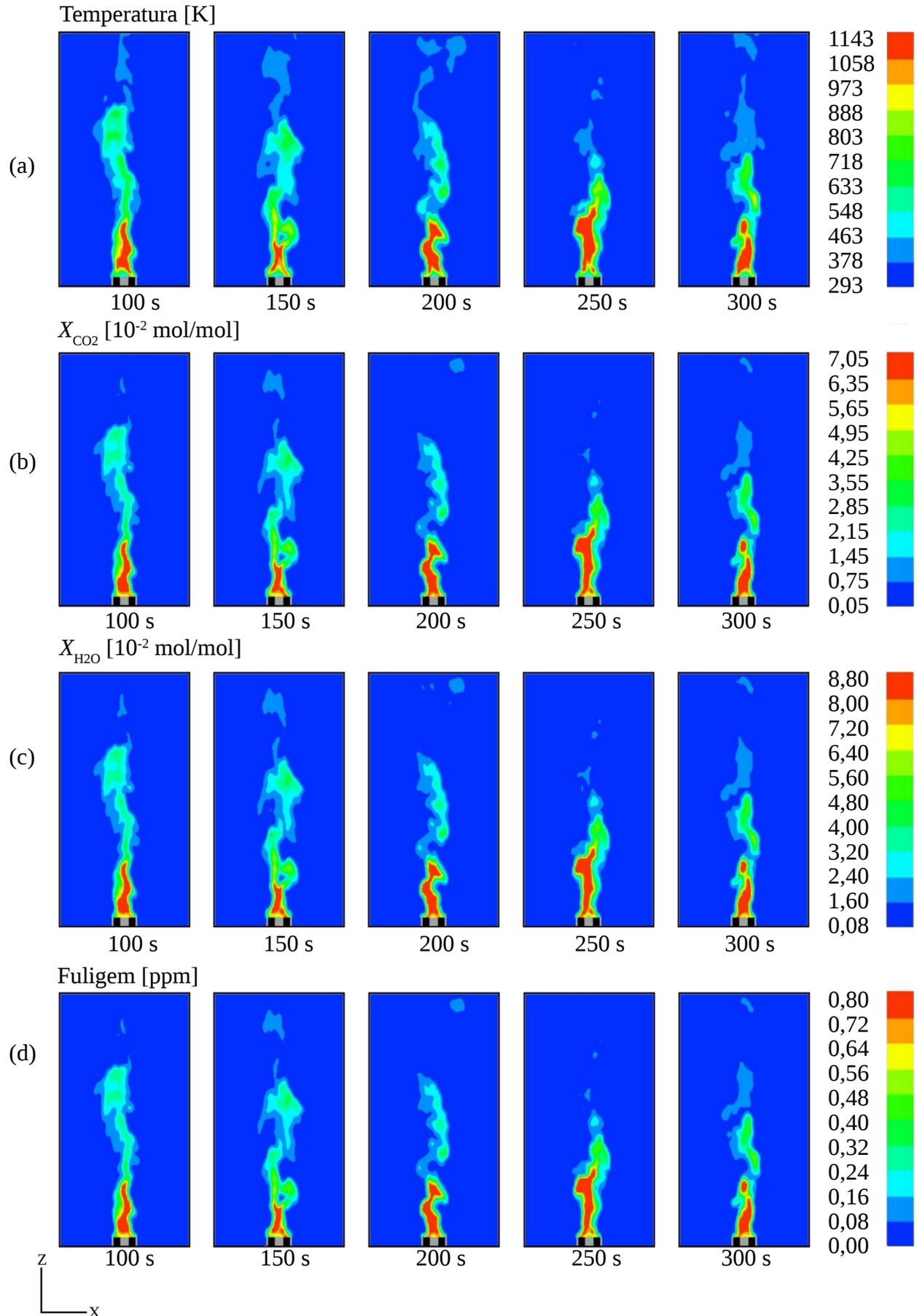


Figura 5.7 - Campos no plano central da poça, em diversos tempos, para as simulações sem fuligem do caso 2, utilizando o modelo GC₃: (a) temperatura, (b) fração molar de CO₂ e (c) fração molar de H₂O e (d) fração volumétrica de fuligem.

Assim, quando a combustão é incompleta e existe fuligem proveniente da combustão, espera-se que os valores de temperatura apresentem uma pequena redução na chama e nas regiões com maior concentração de fuligem. Como o domínio é aberto, não existe concentração de fuligem no ambiente, apenas na chama, a temperatura distante da chama mantém-se constante, o que pode ser visto na Figura 5.8(a). Neste caso, ao considerar a fuligem, há uma pequena redução da fração molar de H_2O , enquanto que os valores da fração molar de CO_2 mantiveram-se constante, o que pode ser visto na Figura 5.8(b). Analisando a Figura 5.8(c) é possível notar valores condizentes para a fração volumétrica de fuligem, com um máximo menor que 1,0 ppm, valor este compatível com produção de fuligem em chamas de n-heptano. Tanto os valores obtidos para as frações molares de CO_2 e de H_2O , quanto de fração volumétrica de fuligem, encontram-se próximos a valores da literatura [Choi et al., 1994; Klassen e Gore, 1994].

Por fim, como o objetivo deste trabalho é analisar os fluxos de calor preditos por cada um dos modelos de gás cinza adotados, comparou-se o valor do fluxo de calor radiativo em diversos pontos. As posições utilizadas são as mesmas daquelas reportadas por Lin et al., 2010. Diversos radiômetros numéricos foram inseridos na parede do domínio para medir o fluxo de calor radiativo da chama e uma simulação foi realizada para cada modelo de gás cinza, considerando ainda simulações com e sem a formação de fuligem. Para a análise dos resultados médios do fluxo de calor adotou-se a mesma abordagem anteriormente citada, selecionando-se o intervalo de tempo onde se pode considerar que o problema atingiu o comportamento de regime permanente (médias das variáveis de interesse não variam no tempo). O intervalo de tempo onde esta condição é satisfeita é entre 100 e 300 s, sendo este o intervalo utilizado para o cálculo dos resultados do fluxo de calor radiativo que são comparados com os dados experimentais.

As Figuras 5.9(a) e 5.9(b) apresentam os resultados obtidos sem a formação de fuligem e com a formação de fuligem, respectivamente, do fluxo de calor radiativo para as 8 posições dos radiômetros utilizados em Lin et al., 2010, para os três modelos estudados (GC_1 , GC_2 e GC_3). A Tabela 5.2 apresenta os desvios percentuais médios para o fluxo de calor radiativo em simulações com e sem fuligem, e apresenta também o desvio percentual na posição referente ao máximo fluxo de calor para a simulação com fuligem. É possível perceber que todos os modelos de gás cinza estudados forneceram resultados que seguem o mesmo comportamento dos dados experimentais, porém subestimando tais valores, sendo o modelo GC_2 aquele que apresentou os resultados mais distantes do experimental, com desvio percentual médio de 16,2% para as simulações com fuligem, enquanto o modelo GC_1 apresentou o desvio percentual médio de 10,9% e o modelo GC_3 de 7,6%. Assim,

considerando o limiar máximo de 10% de desvio percentual em aplicações de engenharia, somente o modelo GC_3 apresentou resultados aceitáveis, embora o modelo de gás cinza padrão do software FDS tenha obtido resultados muito próximos de tal limiar.

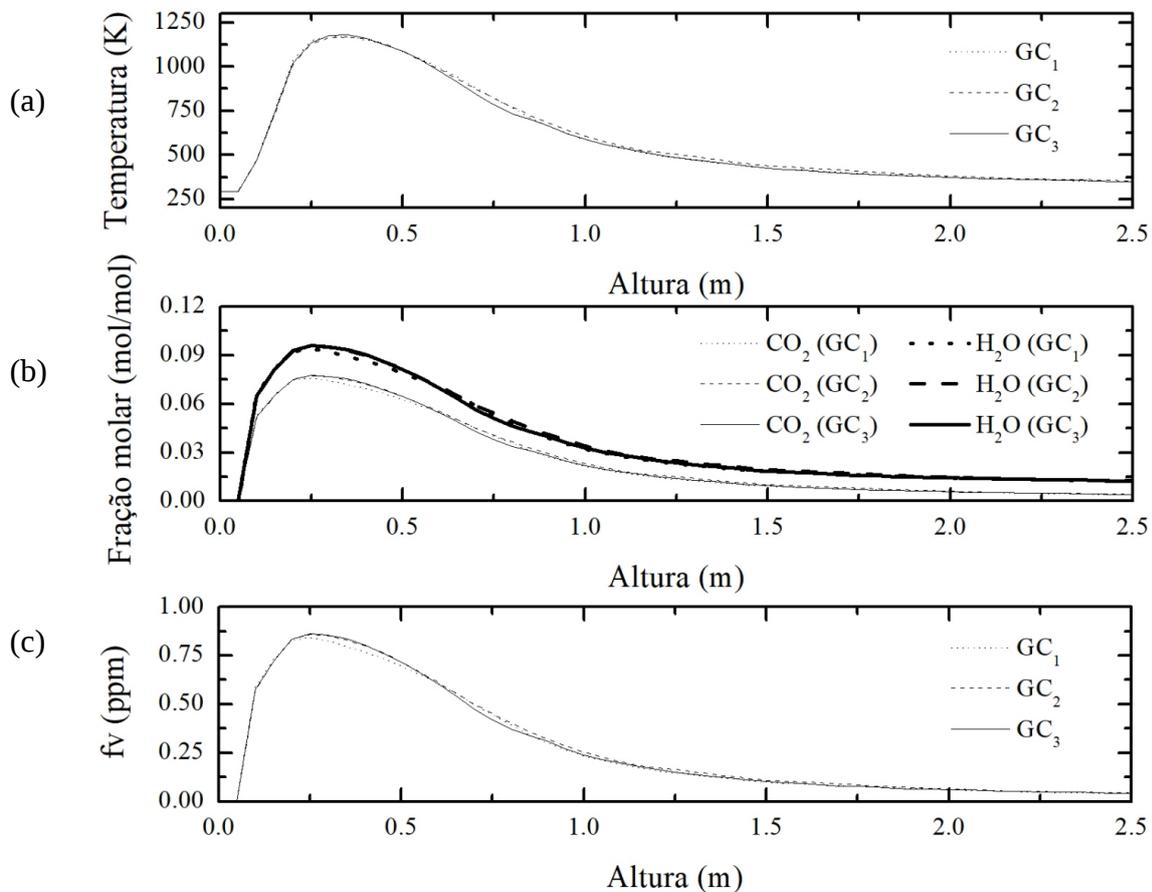


Figura 5.8 - Perfis ao longo da linha de centro da poça para as simulações com fuligem do caso 2, para diversos modelos de gás cinza, no intervalo de tempo de 100 s até 300 s: (a) temperatura, (b) frações molares de CO₂ e H₂O e (c) fração volumétrica de fuligem.

Conforme se observa nas Figuras 5.9(a) e 5.9(b), para todos os modelos estudados, o maior desvio percentual foi encontrado para a posição referente ao radiômetro mais próximo da poça, próximo ao chão, o que pode ter ocorrido em decorrência da construção da base da poça, a qual não foi claramente definida em Lin et al., 2010, podendo assim levar a diferenças na estimativa do fluxo de calor radiativo.

Uma vez que o máximo fluxo de calor é um parâmetro importante em aplicações de incêndio, sendo muitas vezes empregado na engenharia de incêndio para determinar a distância que um bombeiro pode se aproximar do fogo no momento do combate, ou até mesmo o efeito de alastramento do incêndio, analisa-se a seguir a concordância das

estimativas deste fluxo máximo obtidas com os diversos modelos GC em relação ao valor medido. Assim, em relação à estimativa do máximo fluxo de calor, o modelo GC_3 apresentou desvio percentual de apenas 2,7%, enquanto o modelo GC_1 apresentou desvio de 8,9% e o modelo GC_2 de 14,3%. Neste caso, apenas o modelo GC_2 estaria fora da faixa de desvio percentual aceitável em aplicações típicas de engenharia.

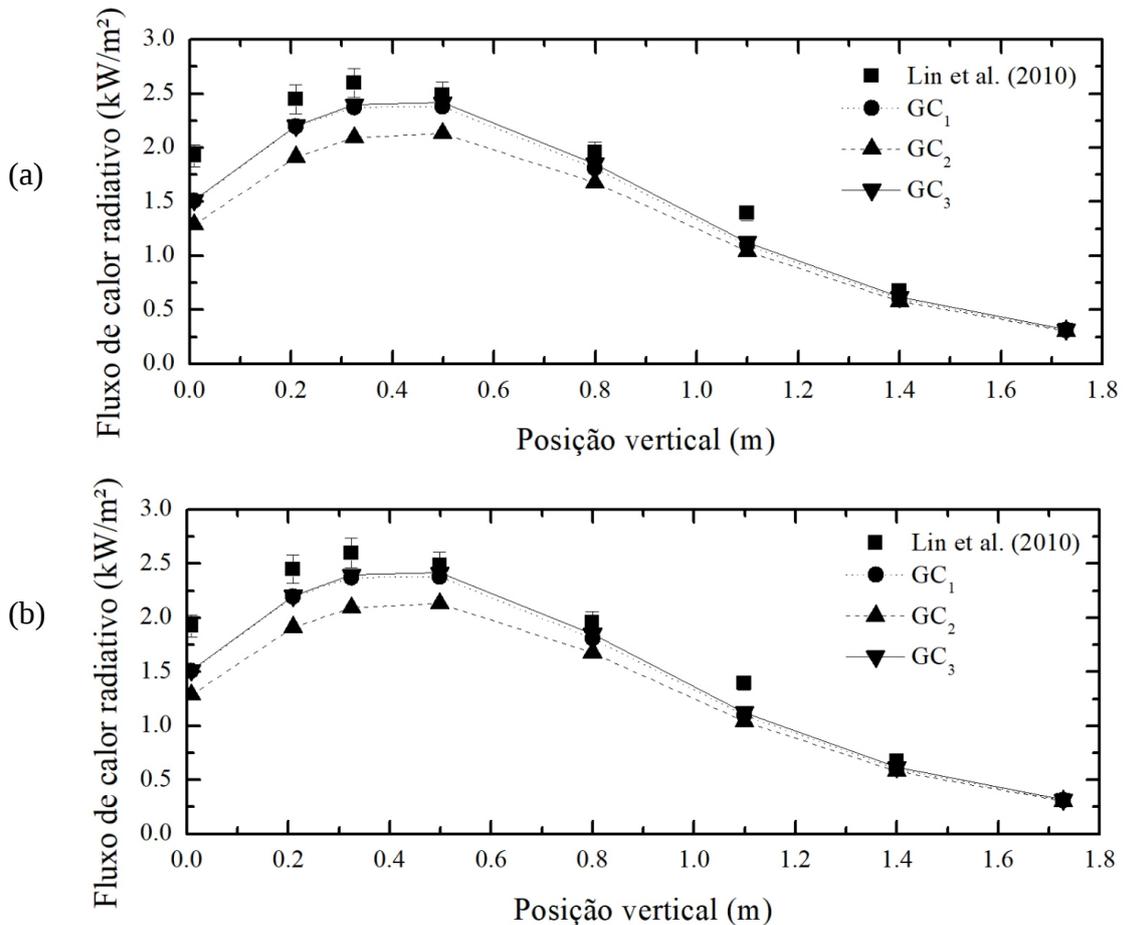


Figura 5.9 - Fluxo de calor radiativo em todas as posições para todos os modelos de gás cinza em comparação ao resultado experimental de Lin et al., 2010, considerando: (a) sem fuligem (b) com fuligem.

Pode-se ainda observar que houve pouca diferença entre os resultados das simulações com e sem fuligem. Isso se deve ao fato de que o combustível n-heptano forma relativamente pouca fuligem, sendo a fração volumétrica máxima inferior a 1,0 ppm no presente estudo (vide Figuras 5.7(b) e 5.8(b)), além do fato de que o domínio (experimental ou computacional) é completamente aberto, fazendo com que a pouca fuligem que é emitida pela chama não fique acumulada no ambiente. Conseqüentemente, pode-se afirmar que os cálculos relativos à transferência de calor radiativa, incluindo o cálculo do fluxo de calor radiativo, são

mais influenciados pelos gases CO_2 e H_2O do que pela fuligem. Dessa forma, o melhor desempenho do modelo GC_3 pode ser atribuído ao melhor ajuste do coeficiente de absorção calculado neste modelo para a mistura gasosa, em contraste ao ajuste polinomial mais simples empregado no modelo GC_2 . Ainda, o modelo GC_3 baseia-se no modelo WSGG para razões variáveis entre as frações molares de H_2O e de CO_2 (conforme Cassol et al., 2014) e não em razões fixas entre tais espécies (como dado em Dorigon et al., 2013), sendo esta escolha decorrente da razão não homogênea $x_{\text{H}_2\text{O}}/x_{\text{CO}_2}$ obtida no presente estudo (por exemplo, na região de máximas $x_{\text{H}_2\text{O}}$ e x_{CO_2} , $x_{\text{H}_2\text{O}}/x_{\text{CO}_2} \approx 1,24$); esta escolha também contribuiu para o melhor desempenho do modelo GC_3 . Os resultados obtidos e desvios médios para cada radiômetro podem ser vistos no Apêndice A.

Tabela 5.2 - Desvios percentuais médios para o fluxo de calor radiativo em simulações com e sem fuligem, e desvios percentuais na posição referente ao máximo fluxo de calor para a simulação com fuligem, para os modelos GC_1 , GC_2 e GC_3 .

	Desvios médios		Desvio no radiômetro de máximo fluxo
	Sem fuligem	Com fuligem	
GC_1	10,7%	10,9%	8,9%
GC_2	18,0%	16,2%	14,3%
GC_3	9,8%	7,6%	2,7%

5.3 Resultados obtidos para o caso 3 – Sahu et al., 2015

Nas Figuras 5.10(a), 5.10(b) e 5.10(c) estão apresentados, respectivamente, os campos de temperatura, fração molar de CO_2 e fração molar de H_2O , para as simulações desconsiderando a formação de fuligem, empregando o modelo de gás cinza do GC_2 . Apenas são mostrados os campos para um modelo de gás cinza porque as diferenças para os diferentes modelos de gás cinza são imperceptíveis no espaço bidimensional. Os campos apresentados na Figura 5.10 foram obtidos em diversos instantes de tempo, dentro do intervalo considerado como regime médio permanente. Para este caso o regime médio permanente foi encontrado entre 200 s e 550 s. A poça está localizada no centro do domínio, as posições $x = y = 0$ e $z = 0,06$ m. Os campos apresentados na figura estão posicionados no plano x - z que passa pelo centro da poça e pelo centro do domínio computacional. De forma semelhante ao primeiro caso, o domínio computacional aqui apresentado possui grandes dimensões, 4 m de largura, assim se optou por apresentar apenas uma parte do domínio, cortando a imagem de forma a mostrar todo o recipiente com o incêndio, a parede que possui a porta e delimitando a altura no teto da sala

para facilitar a visualização dos campos. Pode-se observar que a chama tem uma pequena inclinação lateral que é resultante da circulação de ar que ocorre devido à diferença de temperatura entre o ar de dentro da sala e o ar de fora da sala, uma vez que este domínio possui uma abertura. Para todos os campos (temperatura, fração molar de CO_2 e fração molar de H_2O), os máximos valores são encontrados na região interna da chama e na região próxima a chama. Nas figuras o contorno roxo simboliza a parede acima da porta e também o teto, também nestas figuras o domínio foi cortado à esquerda da chama para melhor visualização de dados. Da mesma forma que nos casos anteriores foram obtidas leituras em diversos instantes de tempo, dentro do intervalo de regime médio permanente, para demonstrar as variações temporais que ocorrem na simulação. Diferentemente dos casos anteriores agora é possível perceber que conforme o tempo avança, as frações molares de CO_2 e de H_2O . Quanto mais tempo o incêndio dura, mais produtos da combustão são emitidos no ambiente, porém, como a porta da sala é de pequena dimensão ocorre a formação de campos mais homogêneos, principalmente acima da porta.

Ainda para os resultados desconsiderando a fuligem na simulação deste caso, obteve-se os valores da distribuição de temperatura e de frações molares de CO_2 e de H_2O passando pela linha de centro da poça e também do domínio, ao longo do eixo z , mantendo os valores de x e y constantes e iguais a 0. Posteriormente os valores de temperatura e frações molares de CO_2 e H_2O foram calculados através da média de todos os pontos em todo o regime médio permanente anteriormente citado (200 s até 550 s) para o caso sem fuligem. A Figura 5.11(a) e 5.11(b) apresenta as distribuições de temperatura e de frações molares de CO_2 e H_2O ao longo do eixo vertical z , ou seja, no centro do domínio.

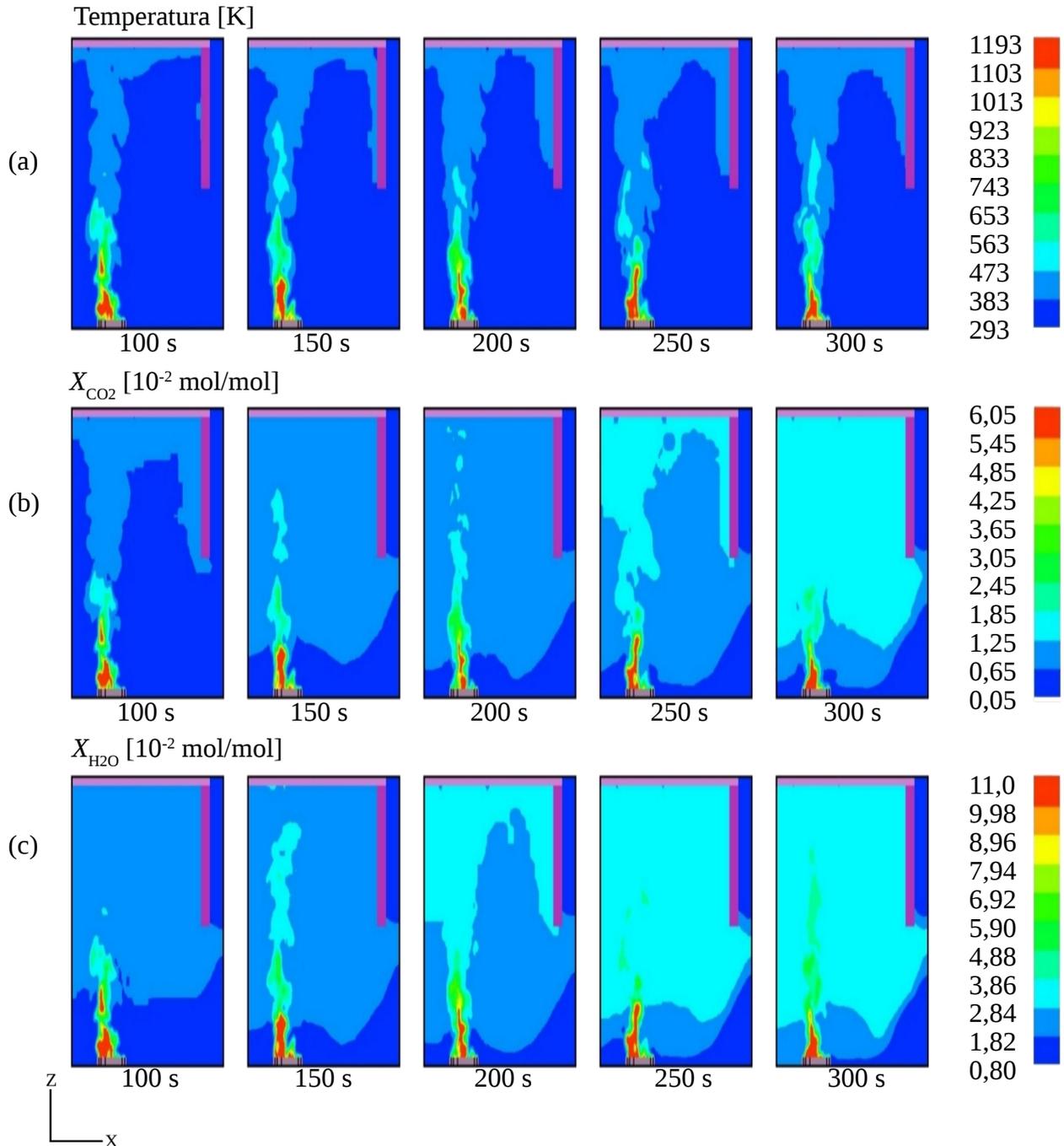


Figura 5.10 - Campos no plano central da poça, em diversos tempos, para as simulações sem fuligem do caso 3, utilizando o modelo GC_2 : (a) temperatura, (b) fração molar de CO_2 e (c) fração molar de H_2O .

A Figura 5.11(a) apresenta a distribuições de temperatura sendo que os valores obtidos para esta distribuição apresentam boa concordância com aqueles encontrados na literatura, onde Wen et al., 2007; Zhang et al., 2015; Maragkos et al., 2017, encontraram valores máximos de temperatura variando entre 1100 K até 1400 K em seus estudos empregando

metanol, que são bastante parecidos com os encontrados na presente simulação, que foram próximos a 1200 K. Em se tratando das frações molares de CO_2 e de H_2O os resultados obtidos apresentam boa concordância com valores de literatura. Calculando a razão estequiométrica entre os valores de x_{CO_2} e $x_{\text{H}_2\text{O}}$ obtém-se um valor aproximadamente de 1,82. Como neste caso está sendo considerada a combustão completa do metanol, representada pela Equação 5.3, a razão estequiométrica entre os coeficientes de H_2O e de CO_2 é de 2, que é um valor próximo àquela obtido com o FDS.

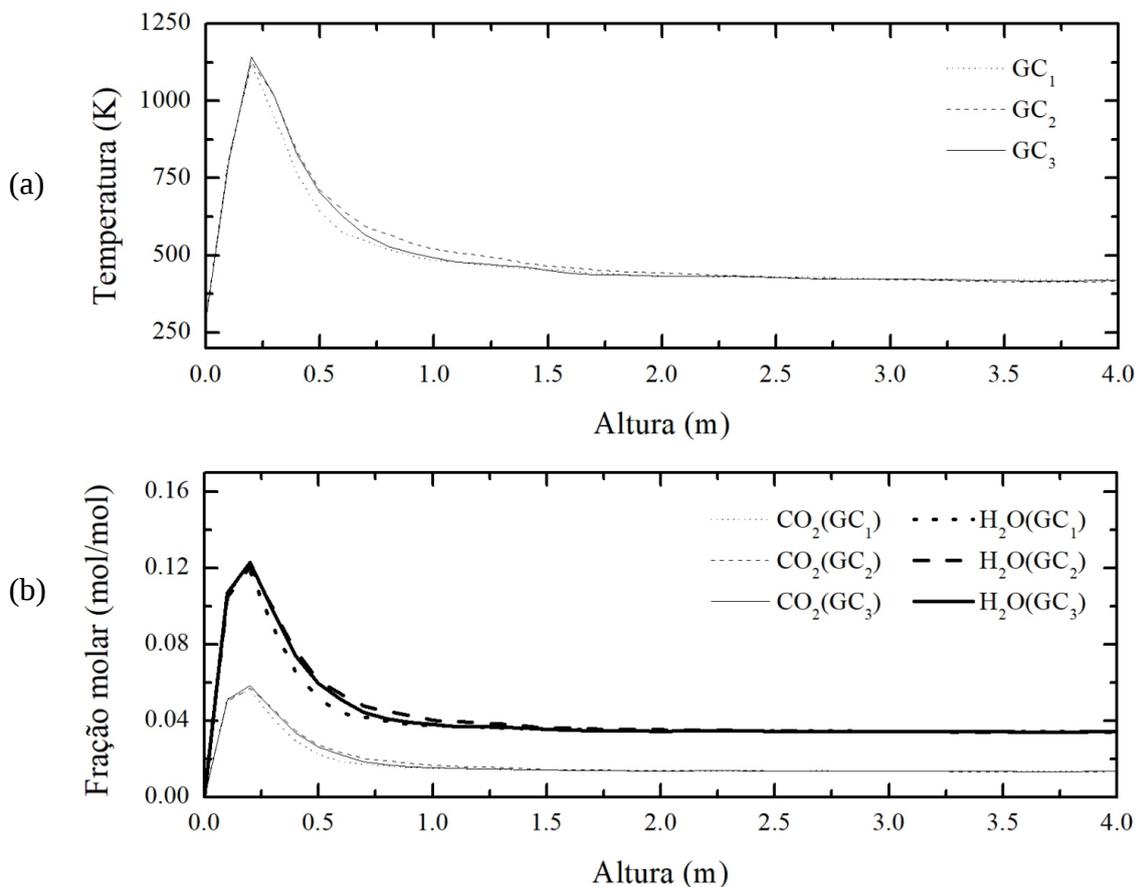


Figura 5.11 - Perfis ao longo da linha de centro da poça para as simulação sem fuligem do caso 3, para os diversos modelos de gás cinza, no intervalo de tempo de 200 s até 550 s: (a) distribuição de temperatura e (b) distribuição das frações molares de CO_2 e H_2O .

Analogamente à Figura 5.10, a Figura 5.12 apresenta os campos de temperatura, fração molar de CO_2 , fração molar de H_2O com o acréscimo do campo de fração volumétrica de

fuligem que antes não era considerado. Uma diferença entre os dois casos mostrados, caso sem fuligem (Figura 5.10) e caso com fuligem (Figura 5.12), está nos instantes de tempo utilizados para demonstrar a evolução temporal da simulação e a variação temporal ocasionada pela metodologia LES empregada. A diferença entre esses instantes de tempo ocorreu porque para o caso sem fuligem o regime médio permanente está localizado entre 200 s e 550 s, tendo em vista que o tempo de simulação total foi menor. Já para o caso com fuligem, a simulação computacional foi realizada por mais tempo, sendo que o regime médio permanente aconteceu no intervalo de 200 s até 900 s, assim resultando na diferença entre os instantes de tempo utilizados nas Figuras 5.10 e 5.12. Para o caso com fuligem optou-se por utilizar diferentes instantes de tempo, cobrindo um maior gama de tempos, para demonstrar melhor o acúmulo de produtos da combustão dentro do domínio conforme o incêndio se desenvolve ao longo do tempo. Mesmo que as simulações tenham tempos computacionais distintos é importante ressaltar que essa diferença não causa nenhuma influência nos cálculos dos resultados porque os valores utilizados tanto na Figura 5.11 quanto na Figura 5.13 são valores médios obtidos através da média dos valores em todo o regime médio permanente de tempo. Mesmo com tempos de simulação distintos também não há influência nos resultados obtidos para o fluxo de calor incidente porque esses valores são comparados em instantes de tempos específicos iguais aos utilizados por Sahu et al., 2015.

Como fica evidente, principalmente nas Figuras 5.12(b), 5.12(c) e 5.12(d) conforme o tempo aumenta, maior é a concentração de produtos dentro do domínio o que é visto através dos campos reportados. Visto que a fuligem em incêndios concentrasse principalmente na chama existe uma redução dos valores de temperatura apresentados no caso com fuligem quando comparado ao caso sem fuligem, sendo que essa variação já era esperada e de acordo com a literatura. Essa variação de temperatura chega a ser até de 100 K dentro da chama, o que pode ocorrer devido à quantidade de fuligem que se concentrou dentro do domínio e assim maior é a transferência de calor, reduzindo a temperatura mais elevada. As frações molares de CO_2 e de H_2O mantiveram-se praticamente constantes em ambos os casos. Sendo que ocorreu um pequeno aumento para as frações molares de CO_2 e de H_2O . Em se tratando dos valores da fração volumétrica de fuligem, o máximo valor chegou próximo de 1,0 ppm na chama, sendo que dentro do domínio os valores de fuligem chegaram próximos de 0,4 ppm.

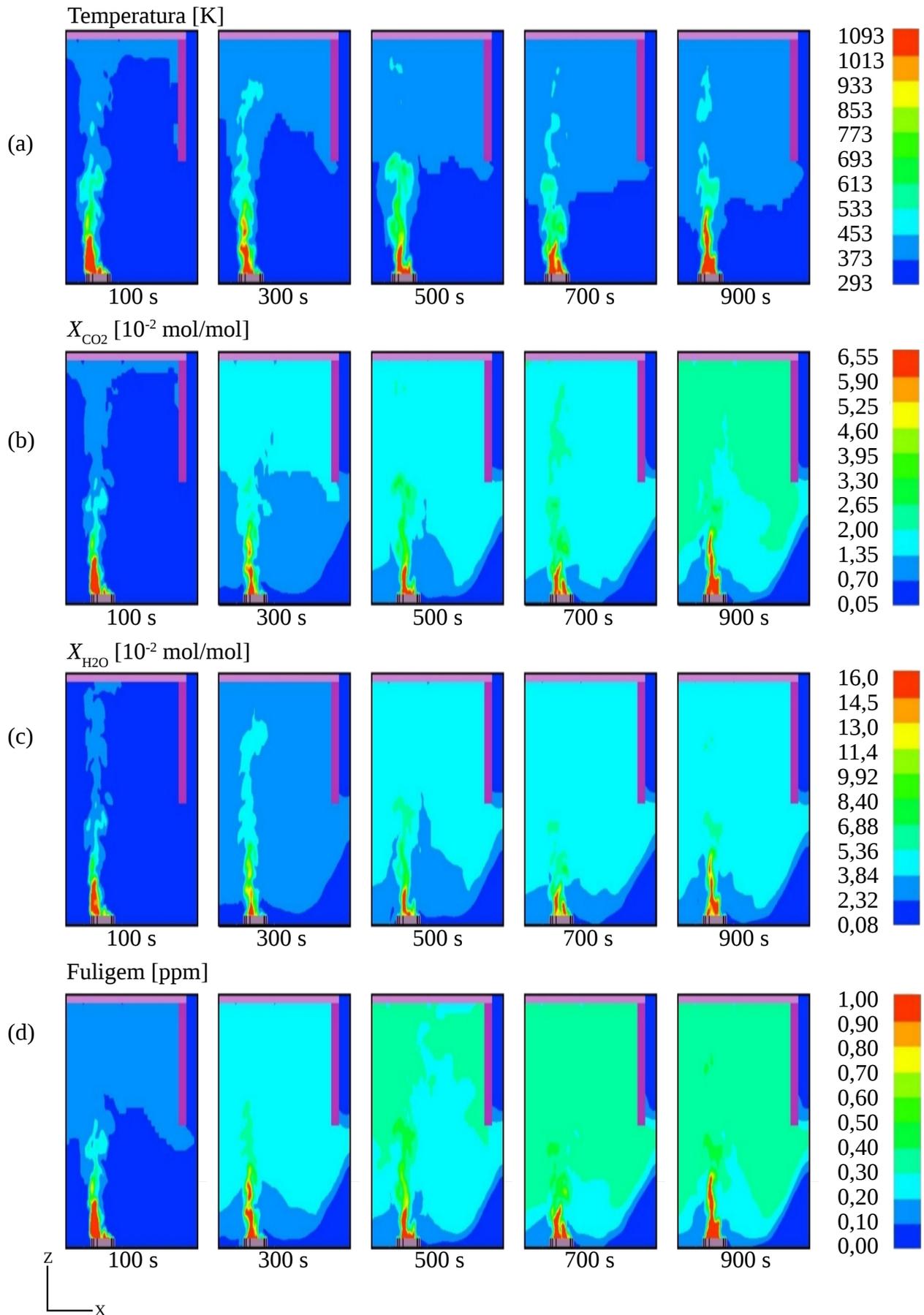


Figura 5.12 - Campos no plano central da poça, em diversos tempos, para as simulações sem fuligem do caso 3, utilizando o modelo GC₂: (a) temperatura, (b) fração molar de CO₂ e (c) fração molar de H₂O e (d) fração volumétrica de fuligem.

Como o metanol é um álcool, então era esperado que os valores de fuligem obtidos fossem nessa ordem ou com alguma variação em torno desses valores. Do mesmo modo que no caso sem a presença de fuligem, a maior concentração de produtos da combustão é na região dentro da chama e também na região logo acima dela, sendo que a maior concentração de fuligem é localizada dentro da chama.

Na Figura 5.13(a), 5.13(b) e 5.13(c) são apresentadas respectivamente as distribuições de temperatura, frações molares de CO_2 e de H_2O e fração volumétrica de fuligem. De maneira análoga a Figura 5.11, a Figura 5.13 representa a distribuição destes valores no plano x - z , ou seja, no eixo vertical que passa pelo centro da chama da poça do domínio. Como o metanol é um combustível com baixa produção de fuligem, espera-se que os perfis das quantidades aqui demonstradas não apresentem grande variação quando comparados aos mesmos perfis dos respectivos campos quando não há fuligem. Analisando a Figura 5.13(a) é possível notar uma redução da temperatura máxima na linha de centro, como era esperado. As frações molares de CO_2 e de H_2O praticamente não se alteraram e se mantiveram constantes para todos os modelos de gás cinza utilizados. Pela Figura 5.13(b), nota-se que a fração volumétrica de fuligem chegou a apresentar um máximo em torno de 1,0 ppm, o que condiz com as características de combustíveis que apresentam pouca fuligem.

Como o objetivo deste trabalho é analisar os fluxos de calor preditos pelos modelos utilizados, comparou-se os valores do fluxo de calor incidente (somatório das parcelas convectiva e radiativa,) por ser o valor reportado por Sahu et al., 2015, sendo que em todos os casos simulados o fluxo de calor convectivo é de no máximo 30% do fluxo de calor total incidente (ou seja, o fluxo de calor radiativo incidente é pelo menos 70% do total). Sensores numéricos para predição do fluxo de calor incidente, do fluxo de calor radiativo e do fluxo de calor convectivo foram utilizados para esta análise. Os sensores são posicionados nas paredes, sendo quatro sensores colocados na parede que possui a abertura da porta e dois sensores em cada uma das demais paredes. Dois sensores localizados na parede da porta estão a 1 m do solo e os outros dois a 3 m do solo sendo que um par (um a 1 m e um a 3 m) está à direita da porta e outro par à sua esquerda. Nas demais paredes os sensores são posicionados no centro da parede (distanto 2 m para cada uma das paredes laterais) um a 1 m de altura e outro a 3 m de altura. Como neste caso os autores não utilizaram médias temporais para a representação dos resultados, apenas plotaram os resultados a partir de dados medidos em determinado instante de tempo, não se utilizou a mesma metodologia anteriormente empregada. Neste caso adotou-se uma média de ± 10 s em torno do instante de tempo desejado, exemplificando, a medida observada por Sahu et al., 2015, é feita no tempo exato de 180 s, então para garantir que não se pegue um valor ou muito alto ou muito baixo na presente simulação, fez-se a

média de 175 s a 185 s, assim resultando na medida do tempo de 180 s. Entretanto, Sahu et al., 2015, adota uma média para as alturas dos sensores, pega-se todos os valores dos sensores que se localizam a 1 m de altura no tempo de 180 s e se calcula a média de todos os sensores neste instante de tempo. O mesmo procedimento é utilizado para calcular os resultados dos sensores posicionados na altura de 3 m.

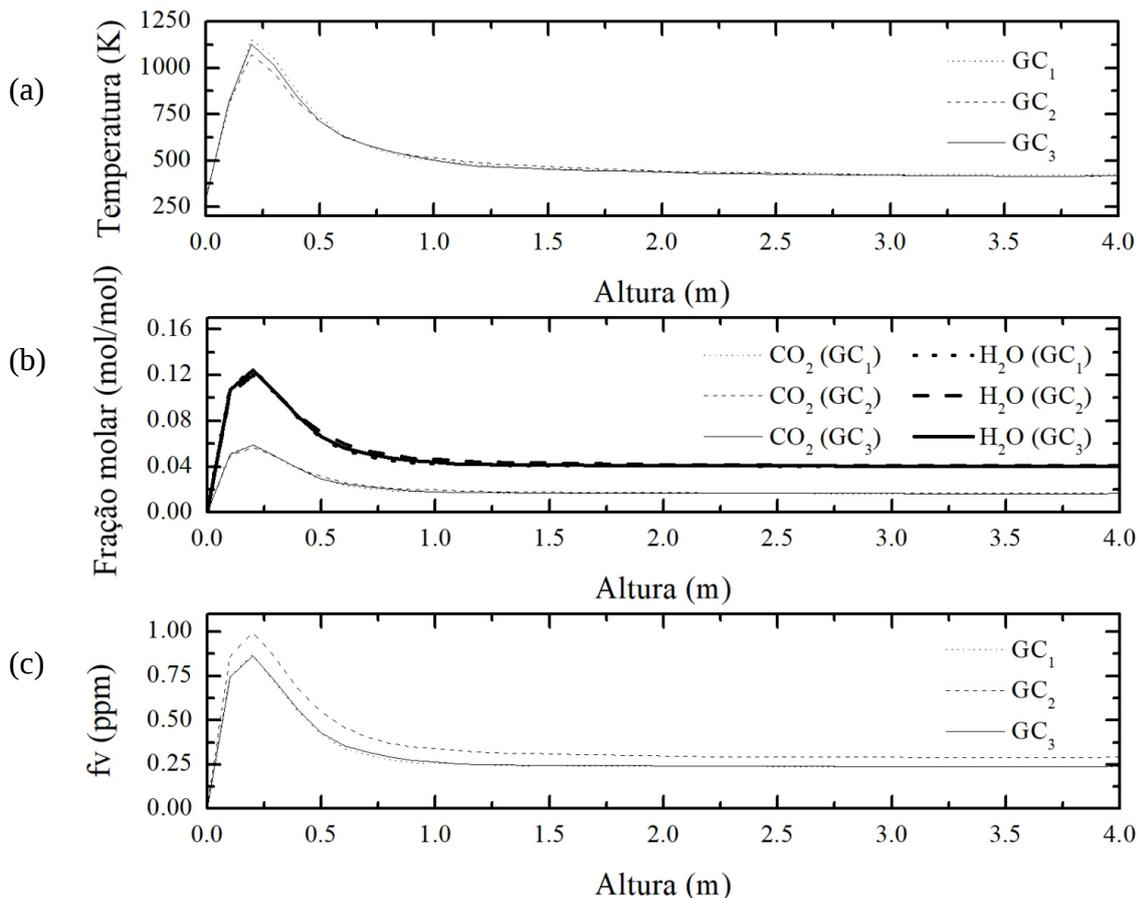


Figura 5.13 - Perfis ao longo da linha de centro da poça para as simulações com fuligem do caso 3, para diversos modelos de gás cinza, no intervalo de tempo de 100 s até 1000 s: (a) distribuição da temperatura, (b) distribuição das frações molares de CO₂ e de H₂O e (c) distribuição da fração volumétrica de fuligem.

As Figuras 5.14(a), 5.14(b), 5.14(c) e 5.14(d) apresentam os resultados obtidos para o fluxo de calor incidente na altura de 1 m com fuligem, 3 m com fuligem, 1 m sem fuligem e 3 m sem fuligem, respectivamente. Através da análise destas figuras é possível perceber que em todos os casos os diferentes modelos de gás cinza empregados na simulação apresentam comportamento similar, e ainda, este comportamento é bastante parecido com aquele dos resultados da literatura, apesar de apresentarem diferenças quantitativas.

Ainda pela análise das Figuras 5.14(a)-(d) é possível perceber que as diferenças são maiores para os sensores localizados a 1 m do chão. Esses sensores sofrem menos influência do aquecimento do ambiente causado pelos produtos da combustão. Mesmo nos casos em que não existe a consideração da fuligem, os fluxos de calor incidente reportados na altura de 1 m são menores; este fato pode ser explicado porque nesta altura já existe o escoamento dos produtos da combustão para fora da sala, tendo em vista que a abertura da porta tem 2 m de altura, mantendo assim a camada mais quente acima da altura de 1 m. Através da quantificação desses resultados das Figuras 5.14(a)-(d) os resultados são comparados em função dos desvios calculados, o que pode ser visto na Tabela 5.3. Os desvios médios obtidos para um dos casos simulados apresentam bons resultados, variando de uma margem de 6% até 14,9%. Como um incêndio em poça pode ser analisado como um problema recorrente em engenharia espera-se obter desvios menores que 10%, os quais não foram obtidos para as simulações que consideram a presença de fuligem no problema abordado. Já quando as simulações não consideram a fuligem nos cálculos, ambos os modelos GC₂ e GC₃ apresentaram resultados abaixo do limite de 10% para a medida feita a 3 m de altura. Tendo em vista que são reportados pelo software resultados em cada instante de tempo, exigindo um tratamento dos resultados para obter os valores que são comparados com os dados experimentais, acredita-se que valor de 12,5% calculado para o GC₃ pode vir a diminuir, levando ao atendimento do requisito de possuir um desvio de 10%.

Para os mínimos desvios calculados em cada um dos casos todos apresentam bons resultados, sendo que se pode encontrar desvios menores que 1% para os resultados obtidos pela simulação. Observa-se que os máximos desvios encontrados para os sensores a 1 m de altura e com fuligem, Figura 5.14(a), são encontrados no primeiro instante de tempo, $t = 180$ s, analisado. Já na posição de 3 m de altura e considerando fuligem, Figura 5.14(b), os máximos desvios foram encontrados no último instante de tempo, $t = 900$ s, o que pode acontecer em decorrência da subestimação da quantidade de fuligem do combustível, pois o valor obtido por Sahu et al., 2015, é maior que o valor obtido na simulação. Para os casos onde não foi considerada a fuligem, no sensor a 1 m de altura, Figura 5.14(c), os máximos desvios foram encontrados na mesma posição em que se encontrou os máximos desvios para o caso com fuligem, com os maiores desvios no primeiro instante de tempo $t = 180$ s. Para os fluxos de calor incidentes medidos a 3 m de altura desconsiderando a fuligem, Figura 5.14(d), os máximos desvios observados aparecem no penúltimo instante de tempo $t = 720$ s. Diferentemente dos casos a 1 m de altura, com e sem fuligem, para o caso a 3 m de altura o máximo desvio foi encontrado em um instante de tempo diferente.

Tabela 5.3 - Cálculo dos desvios relacionados aos fluxos de calor incidente reportados pela Figura 5.14 em comparação aos valores obtidos por Sahu et al., 2015.

		Com fuligem		Sem fuligem	
		1 m de altura	3 m de altura	1 m de altura	3 m de altura
GC ₁	Menor desvio (%)	0,19	4,2	1,0	5,6
	Maior desvio (%)	32,9	18,1	31,7	14,3
	Desvio médio (%)	13,1	12,5	14,5	10,4
GC ₂	Menor desvio (%)	7,5	4,6	5,7	8,2
	Maior desvio (%)	23,2	14,5	24,5	10,7
	Desvio médio (%)	16,4	9,8	14,9	9,6
GC ₃	Menor desvio (%)	1,0	5,3	1,0	4,2
	Maior desvio (%)	33,6	17,6	29,1	7,7
	Desvio médio (%)	14,2	12,4	12,5	6,0

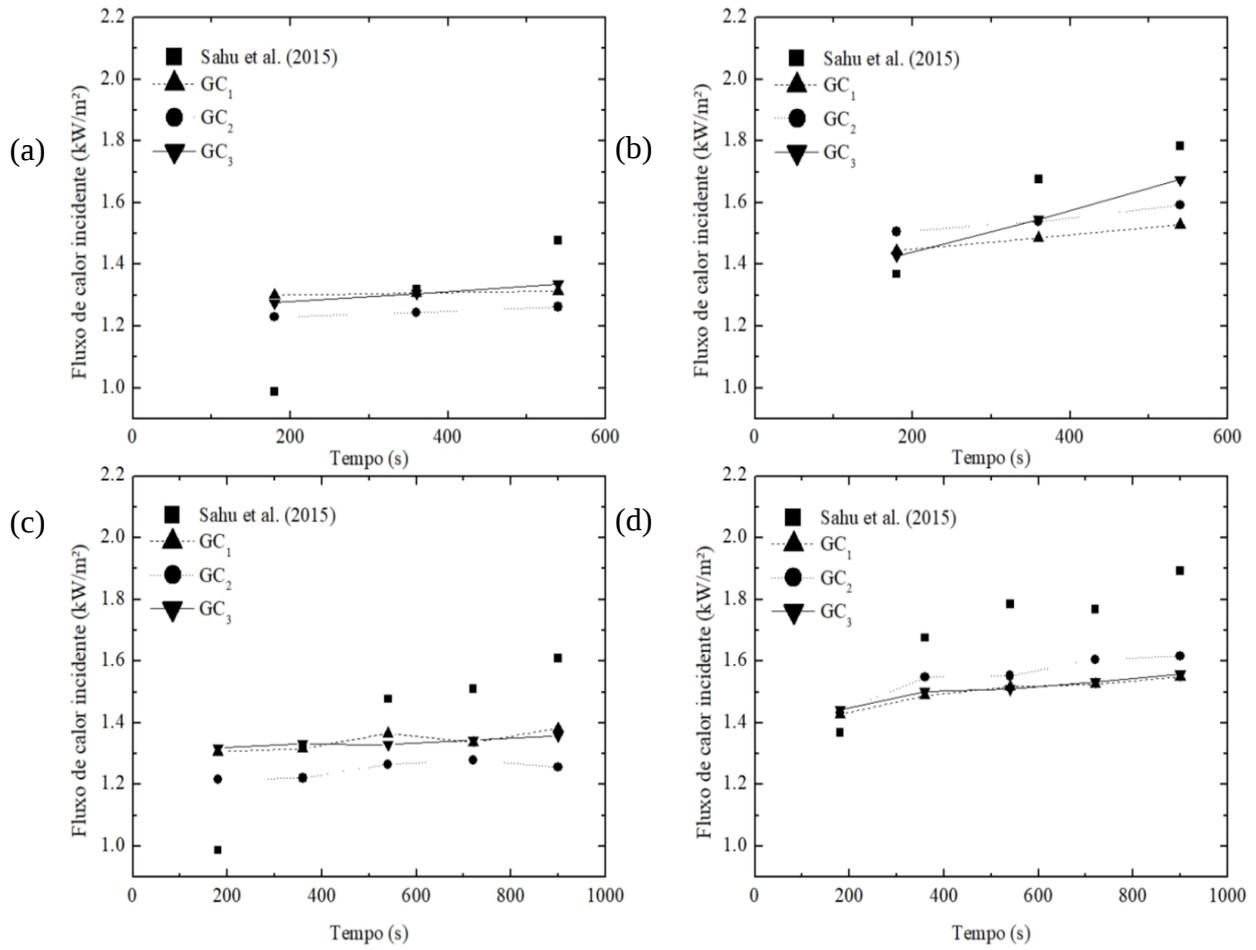


Figura 5.14 - Fluxos de calor incidente para diferentes modelos de gás cinza, com e sem fuligem, e em diferentes posições do domínio: (a) altura de 1 m (sem fuligem), (b) altura de 3 m (sem fuligem), (c) altura de 1 m (com fuligem) e (d) altura de 3 m (com fuligem).

6 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi estudada a implementação de modelos de gás cinza atualizados na rotina de radiação térmica do software *Fire Dynamics Simulator*, o qual é de livre distribuição e possui código aberto, a fim de encontrar melhores resultados na predição de fluxos de calor radiativos de incêndios. O trabalho foi dividido em três partes. Na primeira, realizou-se a implementação dos novos modelos de gás cinza na rotina do software e verificou-se a correta implementação dos mesmos. Na segunda parte, foi desenvolvida a modelagem dos cenários de incêndio empregados, levando em consideração todos os parâmetros necessários para simulação de incêndios e predição de fluxos de calor, como por exemplo a discretização da malha computacional e a discretização do ângulo sólido. Ainda na segunda parte, verificou-se a simulação dos casos de incêndio que foram estudados através da comparação dos resultados obtidos pelo modelo GC₁ (modelo de gás cinza padrão do software FDS) com aqueles apresentados na literatura específica dos casos. Na terceira parte, já com os modelos de gás cinza corretamente implementados e com os modelos computacionais verificados para o GC₁, variaram-se então os modelos de gás cinza. Assim, as simulações foram feitas para o GC₂, no qual o coeficiente de absorção do meio participante é dado por relações polinomiais, e para o GC₃, sendo este um modelo de gás cinza que baseia o cálculo do coeficiente de absorção no modelo WSGG. Para os três modelos de gás cinza as simulações foram realizadas considerando fuligem como um produto da combustão e também considerando a combustão completa do combustível, sem existir fuligem nos produtos da combustão.

Ao analisar todas as etapas realizadas durante o presente estudo, é possível concluir que o software FDS é uma boa ferramenta para a implementação de diferentes modelos de radiação, como é o caso do gás cinza, por ter código aberto e uma rotina bastante organizada na maioria dos aspectos utilizados neste estudo. Para a segunda etapa, conclui-se que o software mostra grande versatilidade na solução de problemas envolvendo incêndios em poças. A discretização da malha é de grande importância para a predição de resultados com maior exatidão. Um ponto importante a ser mencionado é que mesmo sem ser possível utilizar líquidos como fator de entrada pode-se criar um material com as características dos líquidos e de interesse e estes são corretamente tratados pelo software.

Como o software FDS possui modelos de combustão, turbulência e radiação em sua rotina, é importante lembrar da grande dificuldade do correto acoplamento desses complexos modelos. Sabendo que cada modelo exige a solução de diversas equações, a definição de diversos parâmetros específicos, e que os resultados de um modelo são utilizados como parâmetros de outros modelos, se têm que os desvios de um modelo influenciam nos modelos

utilizados depois, assim repassando o desvio anterior calculado. Ao se considerar a importância dos acoplamentos nos resultados finais, mais o FDS se mostra como uma boa alternativa na solução de problemas de incêndios. Além da influência nos desvios dos resultados, o correto acoplamento utilizado entre os modelos influencia diretamente o tempo da simulação. Já que o FDS utiliza a metodologia LES para a modelagem da turbulência, e esta é uma metodologia complexa e que exige recursos computacionais, é necessário utilizar modelos de combustão um pouco mais simples, como é o caso do modelo EDC utilizado. Ainda pensando em tempo computacional, o modelo de gás cinza se torna uma boa alternativa porque é um modelo de menor custo computacional quando comparado a modelos mais complexos, como é o caso do modelo WSGG.

Tendo em vista que a implementação de modelos atualizados de gás cinza para a predição de fluxo de calor radiativo é o objetivo principal desta dissertação, conclui-se que o modelo de gás cinza apresentado por Cassol et al., 2014, GC₂, fornece desvios maiores quando comparados aos outros modelos testados. O modelo padrão do FDS, GC₁, mesmo sendo baseado no RADCAL que é um modelo de banda estreita com poucas informações disponíveis, apresenta bons resultados em se tratando de predição de fluxos de calor radiativo e apresentou resultados intermediários para a maioria dos casos. O modelo de gás cinza baseado no WSGG (GC₃) mostrou os melhores resultados na maioria dos casos, prevendo com maior exatidão os fluxos de calor radiativos, sendo que a maioria dos desvios calculados para este modelo ficaram abaixo de 10%, o que é válido em problemas de engenharia. Como o modelo GC₃ apresenta uma formulação mais detalhada, envolvendo os coeficientes do WSGG, esperava-se que este modelo apresentasse melhores resultados. Não foi possível estabelecer uma relação entre o tempo das simulações, pois não foi possível o desligamento total do modelo de gás cinza padrão do software, sendo assim, os outros modelos podem ter calculado algumas quantidades, como por exemplo do coeficiente de absorção, que não foram utilizados no equacionamento e na solução, assim aumentando o tempo computacional de cada caso.

6.1 Trabalhos futuros

Algumas sugestões para os trabalhos futuros são:

1. Simulação dos casos já estudados utilizando o modelo de bandas largas disponível no software;
2. Implementação de outros modelos de propriedades radiativas, como o WSGG, SLW, ou FSCK, por exemplo.

3. Estudo da variação do parâmetro “*path length*” que o software utiliza como sendo cinco vezes o tamanho do menor volume da malha computacional, porque este parâmetro é utilizado tanto no modelo de gás cinza padrão do FDS como também no modelo de gás cinza baseado no WSGG que foi implementado durante este estudo;
4. Avaliar os diferentes modelos de gás cinza utilizados na simulação de combustíveis que forneçam bastante fuligem, como o diesel;
5. Alteração do código computacional para que seja possível o desligamento total do modelo padrão quando um novo modelo for empregado, e assim se possibilitar a comparação dos tempos computacionais de cada modelo.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Atallah, S.; Drake, E.M. **Safety Considerations in Siting Housing Projects-Handbook**, 1975.

Babrauskas, V. Estimating large pool fire burning rates. **Fire Technol.** 19, 251–261, 1983.

Biswas, K.; Zheng, Y., Kim, C.H.; Gore, J. Stochastic time series analysis of pulsating buoyant pool fires. **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 31, 2581–2588, 2007.

Cassol, F.; Brittes, R.; França, F.H.R.; Ezekoye, O.A. Application of the weighted-sum-of-gray-gases model for media composed of arbitrary concentrations of H₂O, CO₂ and soot. **International Journal of Heat Mass Transfer**, 79, 796–806, 2014.

Cassol, F.; Brittes, R., Centeno; F.R., da Silva, C.V.; França, F.H.R. Evaluation of the gray gas model to compute radiative transfer in non-isothermal, non-homogeneous participating medium containing CO₂, H₂O and soot. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, 37, 163–172, 2015.

Celik, I. RANS/LES/DES/DNS: The Future Prospects of Turbulence Modeling. **Journal of Fluids Engineering**, v. 127, 829–830, 2005.

Çengel, Y.A.; Ghajar, A.J. **Transferência de Calor e Massa**, 2012.

Centeno, F.R. **Modelagem da radiação térmica em chamas turbulentas da combustão de metano em ar**. 2014. Tese – Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Centeno, F.R.; Brittes, R.; França, F.H.R.; da Silva, C.V. Application of the WSGG model for the calculation of gas-soot radiation in a turbulent non-premixed methane-air flame inside a cylindrical combustion chamber. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 93, 742-753, 2016.

Choi, M.Y.; Hamins, A.P.; Rushmeier, H.; Kashiwagi, T. **Simultaneous Optical Measurement of Soot Volume Fraction and Temperature in Heptane Pool Fires**. NIST Special Publicaton, BFRL, National Institute of Standards and Technology, 1993.

Choi, M.Y.; Hamins, A.; Rushmeier, H.; Kashiwagi, T. Simultaneous optical measurement of soot volume fraction, temperature, and CO₂ in heptane pool fire. **Twenty-Fifth Symposium on Combustion/The Combustion Institute**, 1471–1480, 1994.

Coelho, P.J. Turbulence–radiation interaction: from theory to application in numerical simulations. **Journal of Heat Transfer**, 134, n. 3, 2012.

Consalvi, J.L.; Demarco, R.; Fuentes, A.; Melis, S.; Vantelon, J.P. On the modeling of radiative heat transfer in laboratory-scale pool fires. **Fire Safety Journal**. J. 60, 73–81, 2013.

Dalzell, W.H.; Sarofim, A.F. Optical Constants of Soot and Their Application to Heat-Flux Calculations. **Journal of Heat Transfer**. 91, 100, 1969.

De Ris, J.L.; Wu, P.K.; Heskestad, G. Radiation fire modeling. **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 28, 2751–2759, 2000.

Deardorff, J.W. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers. **Journal of Fluid Mechanics**. v. 41, 453, 1970.

Deardorff, J.W. Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model. **Boundary-Layer Meteorology**. v. 18, 495–527, 1980.

Dorigon, L.J.; Duciak, G.; Brittes, R.; Cassol, F.; Galarça, M.; França, F.H.R. WSGG correlations based on HITEMP2010 for computation of thermal radiation in non-isothermal, non-homogeneous H₂O/CO₂ mixtures. **International Journal of Heat and Mass Transfer**. v. 64, 863–873, 2013.

Enayati, H.; Chandy, A.J.; Braun, M.J.; Horning, N. 3D large eddy simulation (LES) calculations and experiments of natural convection in a laterally-heated cylindrical enclosure for crystal growth. **International Journal of Thermal Sciences**. v. 116, 1–21, 2017.

Fischer, S.J.; Hardouin-Duparc, B.; Grosshandler, W.L. The structure and radiation of an ethanol pool fire. **Combustion and Flame**, v. 70, 291–306, 1987.

Fox, R.O. **Computational models for turbulent reacting flows**. Cambridge University Press, 2003.

Fraga, G.C. **Análise da influência das propriedades radiativas de um meio participante na interação turbulência-radiação em um escoamento interno não reativo**, 2016. Dissertação – Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Frenzel, I.; Krause, H.; Trimis, D. Study on the influence of ethanol and butanol addition on soot formation in iso-octane flames. **Energy Procedia**, v. 120, 721–728, 2017.

Grosshandler, W.L. **RADCAL: A narrow-band model for radiation calculations in a combustion environment**. NIST Technical Note 1402, National Institute of Standards and Technology, 1993.

Guedri, K.; Borjini, M.N.; Jeguirim, M.; Brilhac, J.-F.; Saïd, R. Numerical study of radiative heat transfer effects on a complex configuration of rack storage fire. **Energy**, v. 36, 2984–2996, 2011.

Hostikka, S. **Development of fire simulation models for radiative heat transfer and probabilistic risk assessment**, VTT Publication 683, VTT Technical Research Centre of Finland, Espoo, Finland, 2008.

Hottel, H.C.; Sarofim, A.F. **Radiative Transfer**, McGraw-Hill, New York, 1967.

Howell, J.R.; Siegel, R.; Menguc, M.P. **Thermal Radiation Heat Transfer**. CRC Press, 6th edition, 2016.

Incropera, F.P.; Dewitt, D.P.; Bergman, T.L.; Lavine, A.S. **Fundamentals of heat and mass transfer**, John Wiley & Sons, 6th edition, 2007.

Khosousi, A.; Liu, F.; Dworkin, S.B.; Eaves, N.A.; Thomson, M.J.; He, X.; Dai, Y.; Gao, Y.; Liu, F.; Shuai, S. Experimental and numerical study of soot formation in laminar coflow

diffusion flames of gasoline/ethanol blends. **Combustion and Flame**, v. 162, 3925–3933, 2015.

Kim, S.H.; Huh, K.Y. Assessment of the Finite-Volume Method and the Discrete Ordinate Method for Radiative Heat Transfer in a Three-Dimensional Rectangular Enclosure. **Numerical Heat Transfer, Part B**. v. 35, 85–112, 1999.

Klassen, M.; Gore, J.P. **Structure and radiation properties of pool fires**. Final Report, NIST-GCR-94-651, 1994.

Law, C.K. **Combustion physics**. Cambridge University Press, 2006.

Lesieur, M.; Métais, O.; Comte, P. **Large-eddy simulations of turbulence**. Cambridge university Press, 2005.

Leyer, J.-C.; Soloukhin, R.I.; Bowen, J.R. **Dynamics of Reactive Systems Part I: Flames and Configurations; Part II: Modeling and Heterogeneous Combustion**. American Institute of Aeronautics and Astronautics, v. 105, 1986.

Lin, C.-H.; Ferng, Y.-M.; Hsu, W.-S.; Pei, B.-S. Investigations on the Characteristics of Radiative Heat Transfer in Liquid Pool Fires. **Fire Technology**. v. 46, 321–34, 2010.

Liu, F.; Hua, Y.; Wu, H.; Lee, C.; He, X. An experimental study on soot distribution characteristics of ethanol-gasoline blends in laminar diffusion flames. **Journal of the Energy Institute**, v. xxx, 1-12, 2017.

Longenbaugh, R.; Matthews, L. Radiation transport in sooty pool fires: measurement and analysis. **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**. 47, 421–429, 1992.

Magnussen, B.F.; Hjertager, B.H. **On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion**. In 16th Symposium (International) on Combustion, (Elsevier), v. 16, pages. 719–729, Elsevier, 1977.

Maliska, C.R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. Rio de Janeiro: LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2a Ed, 2004.

Maragkos, G.; Beji, T.; Merci, B. Advances in modelling in CFD simulations of turbulent gaseous pool fires. **Combustion and Flame**, v. 181, 22–38, 2017.

McDermott, R.J. **Quality assessment in the Fire Dynamics Simulator: A bridge to reliable simulations**. In Proceedings of Fire and Evacuation Modeling Technical Conference, Baltimore, Maryland, 2011.

McDermott, R. **FDS Road Map**, <https://github.com/firemodels/fds/wiki/FDS-Road-Map>, 2017. Acesso em: 13/03/18.

McDermott, R.; McGrattan, K.; Floyd, J. **A Simple Reaction Time Scale for Under-Resolved Fire Dynamics**. In Fire Safety Science – Proceedings of the 10th International Symposium, v. 10, 809–820, 2011.

McGrattan, K.; Hostikka, S.; McDermott, R.; Floyd, J.; Weinschenk, C.; Overholt, K. **Fire Dynamics Simulator Technical Reference Guide Volume 1: Mathematical Model**.

6th edition, NIST Special Publication, 1018-1, National Institute of Standards and Technology, 2017a.

McGrattan, K.B.; Baum, H.R.; Rehm, R.G. Large eddy simulations of smoke movement. **Fire Safety Journal**, v. 30, 161–178, 1998.

McGrattan, K.B.; Baum, H.R.; Hamins, A. **Thermal radiation from large pool fires**. National Institute of Standards and Technology. US Dep. Commer. USA, 2000.

McGrattan, K.B.; Forney, G.P.; McDermott, R.; Floyd, J.; Weinschenk, C.; Overholt, K. **Fire Dynamics Simulator User's Guide**. 6th edition, NIST Special Publication 1019, National Institute of Standards and Technology, 2017b.

Modak, A.T. Thermal radiation from pool fires. **Combustion and Flame**, v. 29, 177–192, 1977.

Modest, M.F. **Radiative heat transfer**. Academic Press, 2003.

Mudan, K.S. Thermal radiation hazards from hydrocarbon pool fires. **Progress in Energy and Combustion Science**. v. 10, 59–80, 1984.

Pope, S.B. **Turbulent Flows**, Cambridge University Press 1st edition, 2000.

Pope, S.B. Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows. **New Journal of Physics**. v. 6, 1-24, 2004.

Raithby, G.D.; Chui, E.H. A finite-volume method for predicting a radiant heat transfer in enclosures with participating media. **Journal of Heat Transfer**. v. 112, 415–423, 1990.

Rehm, R.G.; Baum, H.R. The equations of motion for thermally driven, buoyant flows. **Journal of Research of the National Bureau of Standards**. v. 83(3), 297-308, 1978.

Rothman, L.S.; Gordon, I.E.; Barber, R.J.; Dothe, H.; Gamache, R.R.; Goldman, A.;

Perevalov, V.I.; Tashkun, S.A.; Tennyson, J. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database. **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**. v. 111, 2139–2150, 2010.

Sagaut, P. **Large eddy simulation for incompressible flows: an introduction**. Springer, 3rd edition, 2006.

Sahu, D.; Jain, S; Shashi; Gupta, A. Experimental Study on Methanol Pool Fires under Low Ventilated Compartment. **Procedia Earth and Planetary Science**. v. 11, 507–515, 2015.

Schumann, U. Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli. **Journal of Computational Physics**. v. 18, 376–404, 1975.

Sikanen, T.; Hostikka, S. Modeling and simulation of liquid pool fires with in-depth radiation absorption and heat transfer. **Fire Safety Journal**. v. 80, 95–109, 2016.

Silva Freire, A.P.; Menut, P.P.P.; Su, J. **Turbulência**, Associação Brasileira de Ciências Mecânicas, Rio de Janeiro, Brasl, 2002.

Sjöström, J.; Amon, F.; Appel, G.; Persson, H. Thermal exposure from large scale ethanol fuel pool fires. **Fire Safety Journal**. v. 78, 229–237, 2015.

Smagorinsky, J. General circulation experiments with the primitive equations. I. The basic experiment. **Monthly Weather Review**. v. 91, 99–164, 1963.

Snegirev, A.Y. Statistical modeling of thermal radiation transfer in buoyant turbulent diffusion flames. **Combustion and Flame**. v. 136, 51–71, 2004.

Sun, B.; Guo, K.; Pareek, V.K. Computational fluid dynamics simulation of LNG pool fire radiation for hazard analysis. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**. v. 29, 92–102, 2014.

Suo-Anttila, J.M.; Blanchat, T.K.; Ricks, A.J.; Brown, A.L. Characterization of thermal radiation spectra in 2m pool fires. **Proceedings of the Combustion Institute**. v. 32, 2567–2574, 2009.

Tu, R.; Fang, J.; Zhang, Y.-M.; Zhang, J.; Zeng, Y. Effects of low air pressure on radiation-controlled rectangular ethanol and n-heptane pool fires. **Proceedings of the Combustion Institute**. v. 34, 2591–2598, 2013.

Tu, R.; Zeng, Y.; Fang, J.; Zhang, Y. Low air pressure effects on burning rates of ethanol and n-heptane pool fires under various feedback mechanisms of heat. **Applied Thermal Engineering**. v. 99, 545–549, 2016.

Vasanth, S.; Tauseef, S.M.; Abbasi, T.; Abbasi, S.A. Simulation of multiple pool fires involving two different fuels. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**. v. 48, 289–296, 2017.

Viskanta, R. Radiation heat transfer in combustion systems. **Progress in Energy and Combustion Science**. 13, 97–160, 1987.

Wang, H.-Y.; Coutin, M.; Most, J.M. Large-eddy-simulation of buoyancy-driven fire propagation behind a pyrolysis zone along a vertical wall. **Fire Safety Journal**. v. 37, 259–285, 2002.

Wang, W.; Xu, Z.; Sun, B. Numerical Simulation of Fire Thermal Radiation Field for Large Crude Oil Tank Exposed to Pool Fire. **Procedia Engineering**. v. 52, 395–400, 2013.

Wang, Y.; Vouros, A.; Zhang, J.; Delichatsios, M.A. Numerical and experimental validation study of flame extent of a pool fire under the ceiling. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**. v. 49, 652–659, 2017.

Wen, J.X.; Kang, K.; Donchev, T.; Karwatzki, J.M. Validation of FDS for the prediction of medium-scale pool fires. **Fire Safety Journal**. v. 42, 127–138, 2007.

Wilcox, D.C. **Turbulence modeling for CFD**. DCW Industries, 3rd edition, 2006.

Zhang, L.; Luo, S.; Zhang, Y.; Tian, W.; Su, G.H.; Qiu, S. Large eddy simulation on turbulent heat transfer in reactor vessel lower head corium pools. **Annals of Nuclear Energy**. v. 111, 293–302, 2018.

Zhang, Q.; Wang, L.; Bi, Y.; Xu, D.; Zhi, H.; Qiu, P Experimental investigation of foam spread and extinguishment of the large-scale methanol pool fire. **Journal of Hazardous Materials**. v. 287, 87–92, (2015).

Zhiyin, Y. Large-eddy simulation: Past, present and the future. **Chinese Journal of Aeronautics**. v. 28, 11–24, 2015.

Zhou, L.; Zeng, D.; Li, D.; Chaos, M. Total radiative heat loss and radiation distribution of liquid pool fire flames. **Fire Safety Journal**. v. 89, 16–21, 2017.

Zukoski, E.E.; Cetegen, B.M.; Kubota, T. **Visible structure of buoyant diffusion flames**. Twentieth Symposium on Combustion/The combustion Institute. 361–366, 1984.

APÊNDICE A – Metodologia para o cálculo do fluxo de calor radiativo

Tendo em vista que se estabeleceu uma metodologia para o cálculo dos fluxos de calor radiativo durante esta dissertação, a qual consiste em utilizar um intervalo de tempo fixo, onde se pode considerar que o problema tem comportamento de regime médio permanente, ou seja, as variáveis de interesse não variam com o tempo. As figuras, Figura A.1 busca demonstrar qual foi o intervalo de tempo do regime médio permanente utilizado para os cálculos nesta dissertação para os casos de Lin et al., 2010. Figura A.1 apresenta a distribuição temporal do fluxo de calor radiativo do radiômetro 4 utilizando o modelo GC_3 e considerando a formação de fuligem. Não é apresentada a distribuição para o caso sem fuligem porque este é similar ao caso em que existe fuligem.

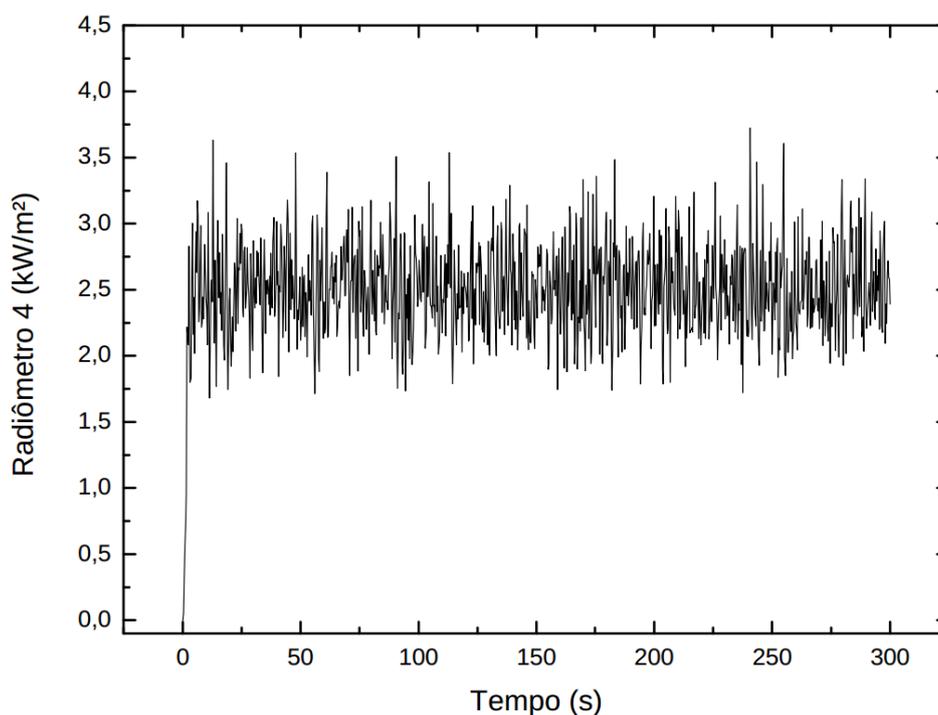


Figura A.1 - Fluxo de calor radiativo temporal obtido para o radiômetro 4 utilizando o modelo GC_3 para o caso de Lin et al., 2010.

Para o terceiro caso estudado, o caso baseado em Sahu et al., 2015, é necessário demonstrar dois intervalos de regime médio permanente porque os tempos de simulação utilizados quando se considerou fuligem e quando não se considerou fuligem, foram

diferentes. Para o caso em que a fuligem não foi considerada o tempo de simulação foi de aproximadamente 600 s sendo que o regime médio permanente obtido da simulação utilizando o modelo GC₂ é apresentado na Figura A.2.

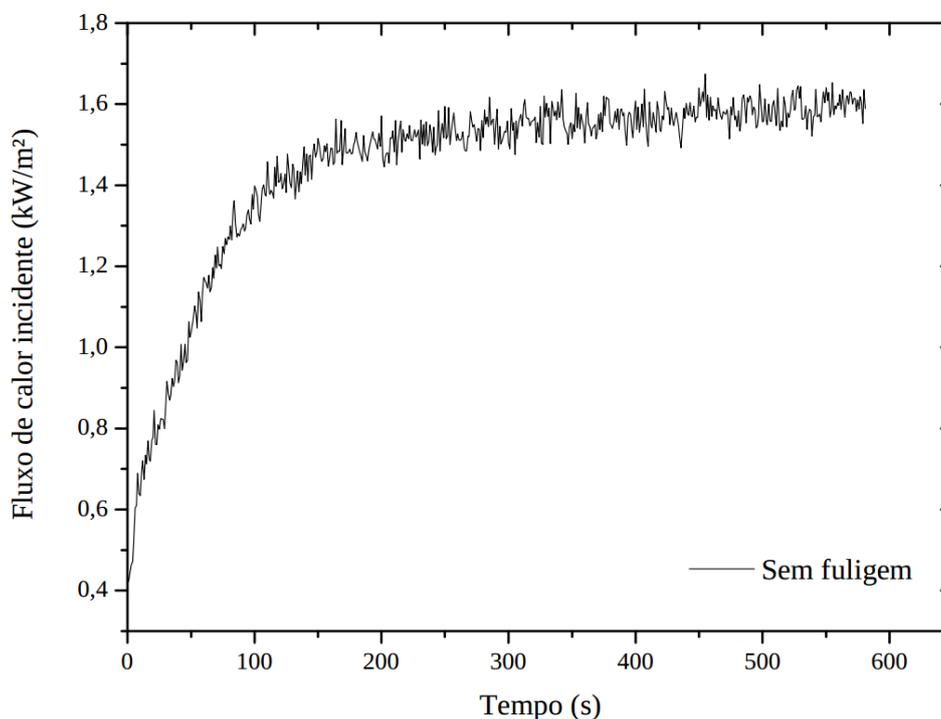


Figura A.2 - Fluxo de calor incidente temporal obtido na altura de 3 m, na parede em que existe a porta, utilizando o modelo GC₂, sem fuligem para o caso de Sahu et al., 2015.

Agora, quando a fuligem foi considerada, o tempo de simulação foi maior, aproximadamente 1000 s, porque se considerou que necessário observar os efeitos da fuligem por um tempo maior. O regime médio permanente para este caso, utilizando o modelo GC₂ e considerando o cálculo da fuligem está demonstrado na Figura A.3. Como já mencionado no decorrer do texto, a diferença entre os tempos de simulação não provocam nenhuma influência nos resultados de temperatura, frações molares de CO₂, H₂O e fração volumétrica de fuligem porque estes são calculados através das médias de todos os valores do regime médio permanente. Já para os resultados do fluxo de calor incidente não ocorre interferência porque os valores do fluxo de calor incidente são computados em determinados instantes de tempo, os quais independem do tempo total de simulação.

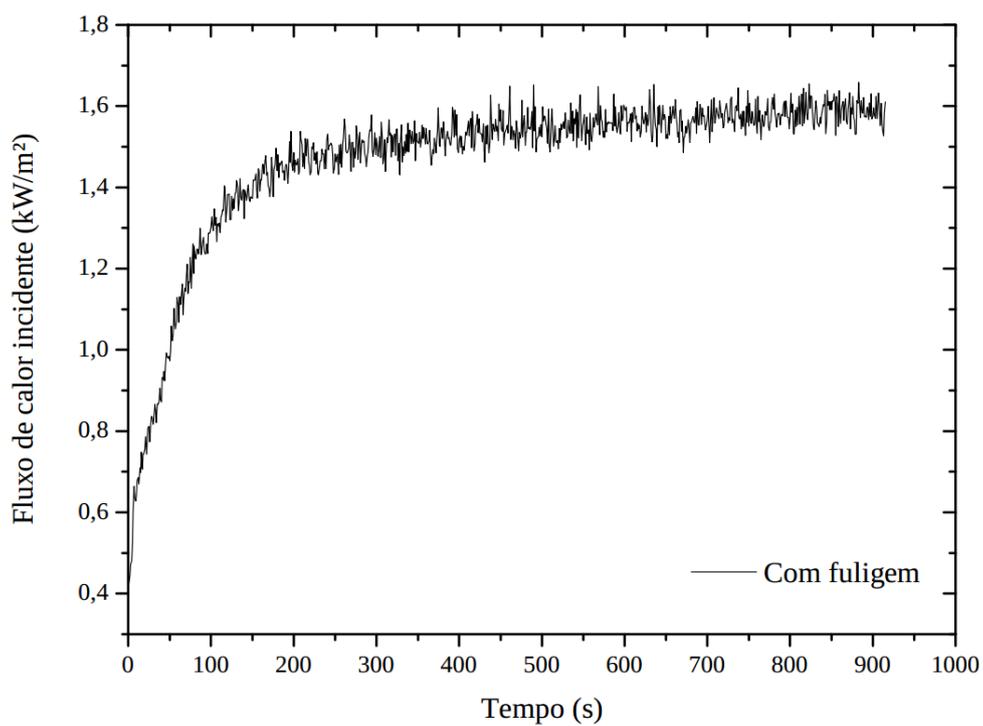


Figura A.3 - Fluxo de calor incidente temporal obtido na altura de 3 m, na parede em que existe a porta, utilizando o modelo GC_2 , com fuligem para o caso de Sahu et al., 2015.

APÊNDICE B – Demais resultados para o caso de Lin et al., 2010

No apêndice B, conforme já mencionado na seção 5.2, para o caso de Lin et al., 2010, são mostrados todos os valores de fluxo de calor radiativo obtidos para todos os radiômetros utilizados na simulação. Do mesmo modo do que foi apresentado na seção 5.2 aqui também foram calculados os desvios percentuais para cada um dos radiômetros.

Tabela B.1 - Fluxos de calor radiativo para o modelo GC₁.

	Referência Lin et al., 2010 (kW/m ²)	GC ₁ sem fuligem (kW/ m ²)	Desvio %, sem fuligem (kW/m ²)	GC ₁ com fuligem (kW/ m ²)	Desvio %, com fuligem (kW/m ²)
Radiômetro 1	1,93	1,51	21,7	1,51	21,7
Radiômetro 2	2,45	2,20	10,3	2,19	10,5
Radiômetro 3	2,60	2,37	8,6	2,36	8,9
Radiômetro 4	2,49	2,38	4,3	2,37	4,6
Radiômetro 5	1,95	1,81	7,4	1,80	7,5
Radiômetro 6	1,39	1,09	21,2	1,10	21,1
Radiômetro 7	0,68	0,60	11,1	0,61	10,5
Radiômetro 8	0,30	0,31	0,8	0,32	2,2

Tabela B.2 - Fluxos de calor radiativo para o modelo GC₂.

	Referência Lin et al., 2010 (kW/m ²)	GC ₂ sem fuligem (kW/ m ²)	Desvio %, sem fuligem (kW/m ²)	GC ₂ com fuligem (kW/ m ²)	Desvio %, com fuligem (kW/m ²)
Radiômetro 1	1,92	1,28867	33,1	1,36	29,1
Radiômetro 2	2,45	1,91	21,9	2,04	16,6
Radiômetro 3	2,60	2,10	19,5	2,23	14,3
Radiômetro 4	2,49	2,13	14,2	2,24	9,9
Radiômetro 5	1,95	1,67	14,3	1,70	12,8
Radiômetro 6	1,39	1,04	25,3	1,03	25,9
Radiômetro 7	0,68	0,58	14,2	0,56	16,4
Radiômetro 8	0,31	0,30	1,4	0,29	4,98

Tabela B.3 - Fluxos de calor radiativo para o modelo GC₃.

	Referência Lin et al., 2010 (kW/m ²)	GC ₃ sem fuligem (kW/ m ²)	Desvio %, sem fuligem (kW/m ²)	GC ₃ com fuligem (kW/ m ²)	Desvio %, com fuligem (kW/m ²)
Radiômetro 1	1,92	1,51	21,4	1,59	17,2
Radiômetro 2	2,44	2,20	9,9	2,33	4,7
Radiômetro 3	2,60	2,40	7,8	2,53	2,7
Radiômetro 4	2,49	2,41	2,8	2,51	1,1
Radiômetro 5	1,95	1,85	5,3	1,87	4,3
Radiômetro 6	1,39	1,13	19,2	1,12	19,9
Radiômetro 7	0,68	0,62	8,8	0,61	10,5
Radiômetro 8	0,30	0,32	3,2	0,31	0,8