

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

SIMULAÇÃO DA PROPAGAÇÃO DE CHAMAS PRÉ-MISTURADAS DE
HIDROGÊNIO E AR EM DUTOS FECHADOS COM OBSTÁCULOS CONSIDERANDO
DIFERENTES RAZÕES DE BLOQUEIO E RAZÕES DE EQUIVALÊNCIA

por

Raphael de Freitas Espíndola

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia Mecânica

Porto Alegre, Novembro de 2025

SIMULAÇÃO DA PROPAGAÇÃO DE CHAMAS PRÉ-MISTURADAS DE
HIDROGÊNIO E AR EM DUTOS FECHADOS COM OBSTÁCULOS CONSIDERANDO
DIFERENTES RAZÕES DE BLOQUEIO E RAZÕES DE EQUIVALÊNCIA

por

Raphael de Freitas Espíndola

Engenheiro Mecânico

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, 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 Mecânica

Área de Concentração: Fenômenos de transporte

Orientador: Prof. Dr. Andrés Armando Mendiburu Zevallos

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Christian Jeremi Coronado Rodrigues - UNIFEI

Prof. Dr. Felipe Roman Centeno - UFRGS / PROMEC

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

Prof. Dr. Daniel Milbrath Leon

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 03 de Novembro de 2025

“O placar toma conta de si”

Bill Walsh

AGRADECIMENTOS

Dedico esta dissertação, em primeiro lugar, à memória do meu avô, Vlademir, cuja influência foi decisiva para que eu trilhasse este caminho acadêmico. Mestre em Direito, ele sempre foi meu maior exemplo de dedicação ao conhecimento e minha principal inspiração para tornar-me também mestre. Foi ele quem, com generosidade e amor, custeou minha formação universitária e nunca deixou de me incentivar a buscar o saber com profundidade e seriedade. Sua ausência física jamais diminuirá a presença que ele ocupa em meu coração e em minha trajetória. Esta conquista é, sobretudo, dele.

Dedico também aos meus ex-colegas de trabalho, especialmente ao Cláudio, ao Gabriel e ao Marcelo, com quem tive o privilégio de atuar no setor de Pesquisa e Desenvolvimento.

À minha avó, Lurdinha, agradeço profundamente pelo apoio financeiro contínuo.

À minha mãe e irmão, Paula e Gabriel, dedico esta conquista pelo apoio incondicional às minhas escolhas, mesmo quando pareciam distantes da realidade.

Ao meu pai, Adriano, por ter sido o incentivador da minha escolha pela Engenharia.

À Victoria, que em meio às incertezas e aos momentos em que até mesmo eu deixei de acreditar em minha própria capacidade, foi ela quem acreditou. Sua confiança me sustentou, e seu carinho foi meu alento em momentos difíceis. Tornou-se uma forte fonte de acolhimento e confiança quando as minhas forças faltavam. Sua presença e incentivo foram fundamentais.

Ao meu amigo, Arthur, que contribuiu com valiosa ajuda técnica em momentos-chave da pesquisa, fornecendo equipamentos e auxiliando na resolução de dúvidas.

À família Althoff, por todo o apoio logístico e emocional durante minha transição para a cidade de Porto Alegre. Sua generosidade foi essencial.

Aos laboratórios de detonações e explosões e o de radiação térmica da UFRGS, por oferecer auxílio técnico ao longo de toda a pesquisa e equipamentos para auxílio dos cálculos numéricos, respectivamente.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo suporte financeiro para a elaboração deste trabalho.

Agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo suporte financeiro para a elaboração deste trabalho.

E, por fim, aos amigos Giulia, Gessica e Mateus, pela parceria nas tardes de estudo, que trouxeram o foco e a disciplina necessários. Foram mais que amigos, foram pilares de apoio.

RESUMO

A combustão confinada de misturas hidrogênio-ar em presença de obstáculos gera uma intensificação da turbulência que aceleração de frente de chama. Este trabalho investiga numericamente, via Simulações de Grandes Escalas (LES) com submalha de Smagorinsky–Lilly no ANSYS Fluent, a influência da razão de bloqueio (BR) e da razão de equivalência (Φ) na propagação de chamas pré-misturadas em duto confinado, com e sem obstáculos. A geometria foi modelada tridimensionalmente e com uma malha de 1×10^6 elementos, a fim de se ter equilíbrio entre custo computacional e precisão. A análise comparativa entre os resultados produzidos e dados experimentais baseou-se em comparação qualitativa e quantitativa com dados experimentais da literatura (caso sem obstáculos), extraindo-se a posição da frente por isosuperfície $T=1000$ K e monitorando-se pressão em ponto interno do escoamento. Uma vez estabelecida a fidelidade do modelo numérico, conduziu-se as simulações com BR (0,0; 0,3; 0,5; 0,7) e Φ variada (0,8; 1,0; 1,2). Para $\Phi=1,0$, o aumento de BR elevou a velocidade máxima de frente, e reduziu o tempo de trânsito, estando em concordância com dados experimentais de demais estudos. As séries temporais de pressão evidenciaram pico acentuado para BR=0,7, valores intermediários para BR=0,5 e crescimento mais gradual para BR=0,3, contrastando com o caso de referência sem obstáculos que apresentou os menores valores de pico de pressão. Os campos de escoamento mostraram jatos laterais, intensas camadas de cisalhamento e recirculações a jusante do obstáculo, alimentando instabilidades (Kelvin–Helmholtz, Richtmyer–Meshkov e Rayleigh–Taylor) que enrugam a frente, aumentam a área reativa e explicam a aceleração observada, incluindo morfologias características. A razão de equivalência apresentou influência secundária aparente na modulação da velocidade da frente de chama, em concordância geral com tendências experimentais. Entretanto, tal conclusão permanece limitada pelo uso de um mecanismo global de uma etapa, baseado em cinética de Arrhenius calibrada exclusivamente para a condição estequiométrica. Assim, a análise para misturas pobres ou ricas deve ser interpretada com cautela, uma vez que a modelagem simplificada não captura adequadamente as variações na razão de equivalência. O modelo validado fornece base para avaliação de risco, diretrizes geométricas e estudos futuros com modelagens químicas mais detalhadas e refino local na região de ignição.

Palavras-chave: Combustão confinada; Hidrogênio-ar pré-misturados; Simulações de Grandes Escalas (LES); Razão de bloqueio; Razão de equivalência, aceleração de chama.

ABSTRACT

Confined combustion of hydrogen–air mixtures in the presence of obstacles enhances turbulence and accelerates premixed flame fronts. This study numerically investigates, via Large-Eddy Simulation (LES) with the Smagorinsky–Lilly subgrid-scale model implemented in ANSYS Fluent, the influence of blockage ratio (BR) and equivalence ratio (Φ) on the propagation of premixed flames in a closed duct, with and without obstacles. The three-dimensional geometry was discretized with a 1×10^6 -cell mesh to balance accuracy and computational cost. Model fidelity was first established for the unobstructed case through qualitative and quantitative comparison with experimental data from the literature, extracting the flame-front position from the $T = 1000$ K isosurface and monitoring the pressure at an internal probe. After validation, simulations were conducted for BR = 0.0, 0.3, 0.5, 0.7 and $\Phi = 0.8, 1.0, 1.2$. For $\Phi = 1.0$, increasing BR enhanced the maximum flame-front velocity and reduced the transit time, in agreement with experimental findings from other studies. Pressure time-series revealed a pronounced peak for BR = 0.7, intermediate values for BR = 0.5, and more gradual growth for BR = 0.3, contrasting with the obstacle-free reference case, which exhibited the lowest peak pressures. Flow fields showed lateral jets, strong shear layers, and downstream recirculation zones that foster instabilities (Kelvin–Helmholtz, Richtmyer–Meshkov, and Rayleigh–Taylor), which wrinkle the flame, increase the reactive area, and explain the observed acceleration, including characteristic morphologies. The equivalence ratio exhibited an apparently secondary influence on flame-front modulation, generally consistent with experimental trends. However, this conclusion remains limited by the use of a one-step global mechanism based on Arrhenius kinetics calibrated exclusively for the stoichiometric condition. Therefore, analyses for lean or rich mixtures should be interpreted with caution, given that the simplified modeling does not adequately capture variations in equivalence ratio. The validated model provides a basis for risk assessment, geometric design guidelines, and future studies employing more detailed chemical kinetics and local refinement in the ignition region.

Keywords: confined combustion; hydrogen–air premixed flames; Large-Eddy Simulation (LES); blockage ratio; equivalence ratio; flame acceleration.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO.....	1
1.1	Motivação	7
1.2	Revisão Bibliográfica.....	9
1.3	Objetivos.....	20
1.3.1	Objetivo geral.....	20
1.3.2	Objetivos específicos.....	20
1.4	Organização do Trabalho.....	20
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	22
2.1	Fundamentos da propagação de chamas	22
2.2	Cinética química da combustão de hidrogênio e ar.....	25
2.3	Morfologias características da propagação de chamas	26
2.4	O fenômeno de transição de deflagração para detonação	28
2.5	Instabilidades hidrodinâmicas e interação com a frente de chama	29
2.5.1	Instabilidade de Rayleigh–Taylor	30
2.5.2	Instabilidade de Richtmyer–Meshkov	32
2.5.3	Instabilidade Kelvin–Helmholtz.....	35
2.5.4	Instabilidade Landau–Darrieus	37
2.5.5	Instabilidade celulares e acústicas	38
2.5.6	Considerações sobre o efeito de obstáculos nas instabilidades	40
2.6	Equações de conservação aplicadas à propagação de chamas reativas.....	42
2.7	Propagação de chamas turbulentas	43
2.8	Simulações de grandes escalas (LES)	47
3	METODOLOGIA	52
3.1	Parâmetros de entrada	55
3.2	Modelo computacional	55
3.2.1	Metodologia de turbulência	54
3.2.2	Modelos de Submalha (SGS)	55
3.2.3	Método de solução numérica	56
3.3	Definição de parâmetros	59

3.3.1	Geometria	59
3.3.2	Definição da Malha	61
3.3.2.1	Condições de parede	62
3.3.2.2	Tamanho de elementos	62
3.3.2.3	Qualificação da malha	63
3.4	Implementação e solução numérica do modelo.....	67
3.4.1	Seleção do <i>solver</i>	67
3.4.2	Mecanismo de cinética química	68
3.4.3	Ignição.....	70
3.4.4	Controle e estabilidade numérica.....	72
3.4.5	Parâmetros iniciais.....	74
3.4.6	Tratamento e análise dos dados obtidos	75
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	77
4.1	Análise comparativa do modelo	77
4.2	Resultados obtidos para simulações com obstáculos de diferentes BR	88
4.3	Resultados obtidos para simulações com obstáculos de diferentes Φ	96
4.4	Análise da influência de obstáculos na frente de chama.....	99
4.5	Comparativo da velocidade máxima para todos os casos simulados.....	104
5	CONCLUSÕES	111
5.1	Sugestões para Trabalhos Futuros.....	113
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	114
APÊNDICE A	Outros Exemplos de Figuras e Tabelas.....	121
APÊNDICE B	Guia de referências	125

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Exemplo de dutos com diferentes seções transversais.....	4
Figura 1.2	Exemplo de dutos com diferentes seções transversais e mesmo princípio de obstáculos	5
Figura 1.3	Exemplos de dutos com diferentes tipos de obstáculos	6
Figura 2.1	Imagem ilustrativa da região de reação química que divide os produtos queimados dos reagentes não queimados	23
Figura 2.2	Formatos característicos de superfície de frente de chama para chamas pré-misturadas de hidrogênio e ar em dutos confinados	27
Figura 2.3	Imagem ilustrativa da configuração da instabilidade RT, na qual o torque baroclínico na interface cria vorticidade e induz um campo de velocidade que a aumenta	31
Figura 2.4	Imagem ilustrativa das estruturas características de “espinhos” e “bolhas”	32
Figura 2.5	Imagem ilustrativa da formação de vórtices baroclínicos	34
Figura 2.6	Imagem ilustrativa da instabilidade RM em dutos	35
Figura 2.7	Imagem ilustrativa da instabilidade KH	37
Figura 2.8	Imagem ilustrativa da instabilidade LD, onde em (a) tem-se uma visualização bidimensional e em (b) tridimensional	38
Figura 2.9	Imagem experimental da instabilidade celular capturado por Ciccarelli e Dorofeev, 2008	39
Figura 2.10	Representações da atuação da influência de obstáculos em instabilidades para dados experimentais (a) e numéricos (b) gerados por Jiang et al., 2024	41
Figura 2.11	Imagem ilustrativa da formação de “espinhos” e “bolhas” em dutos	41
Figura 2.12	Interação entre frente de chama e redemoinhos turbulentos	43
Figura 2.13	Diagrama de regimes para combustão turbulenta pré-misturada.....	45
Figura 3.1	Fluxograma da estrutura da metodologia empregada	52
Figura 3.2	Dimensões da geometria sem obstáculos	60

Figura 3.3	Geometria tridimensional seccionada do duto simples na vista isométrica	60
Figura 3.4	Dimensões da geometria com obstáculos	61
Figura 3.5	Geometria tridimensional seccionada do duto com obstáculo de razão de bloqueio equivalente a 0,5	61
Figura 3.6	Vista isométrica com a funcionalidade de <i>Aspect Ratio</i> acionada ...	64
Figura 3.7	Vista isométrica com a funcionalidade de <i>Skewness</i> acionada	65
Figura 3.8	Vista isométrica com a funcionalidade de <i>Orthogonal Quality</i> acionada	66
Figura 3.9	Posição da fagulha que dá início a reação	70
Figura 4.1	Comparativo dos resultados experimentais obtidos por Jiang et al., 2024, e os resultados do contorno de temperatura para a presente pesquisa	79
Figura 4.2	Comparação dos dados experimentais e resultados numéricos no plano de centro e o plano das paredes	81
Figura 4.3	Comparação da posição da frente de chama em função do tempo entre dados experimentais de Jiang et al., 2024 e resultados numéricos obtidos no presente estudo com malha de 1 milhão de elementos	82
Figura 4.4	Comparação da pressão em função do tempo entre dados experimentais de Jiang et al. (2024) e resultados numéricos obtidos no presente estudo para o ponto fixo localizado na extremidade final do duto (0,047; 0,025; 0,000)	83
Figura 4.5	Comparação da posição da frente de chama em função do tempo para diferentes refinamentos de malha (250 mil, 500 mil e 1 milhão de elementos) e dados experimentais de Jiang et al., 2024	83
Figura 4.6	Comparativo do contorno de temperatura para cada refinamento de malha empregado para um mesmo instante de tempo	85
Figura 4.7	Análise de sensibilidade de malha para a pressão em função do tempo no ponto fixo localizado na extremidade final do duto (0,376; 0,025; 0,000), comparando diferentes refinamentos (250	

	mil, 500 mil e 1 milhão de elementos) e dados experimentais de Jiang et al., 2024	87
Figura 4.8	Comparação qualitativa entre os dados experimentais (a) e a simulação com obstáculo de BR igual a 0,5 para $\Phi = 1,0$	88
Figura 4.9	Comparação dos mapas de contorno de temperatura no plano médio para três razões de bloqueio: BR = 0,3; 0,5; e 0,7 ($\Phi = 1,0$), nos mesmos instantes	91
Figura 4.10	Posição da frente de chama ao longo do tempo para BR = 0,0 (sem obstáculo), 0,3; 0,5; e 0,7 ($\Phi = 1,0$)	93
Figura 4.11	Evolução temporal da pressão no ponto (0; 0,25; 0,376) para $\Phi=1,0$, comparando BR = 0,3; 0,5; 0,7 e referência Jiang et al., 2024 sem obstáculos	94
Figura 4.12	Comparativo da velocidade da frente de chama em função da posição para diferentes razões de bloqueio	95
Figura 4.13	Comparativo da posição da frente de chama em função do tempo para diferentes razões de equivalência ($\Phi = 0,8; 1,0; 1,2$), com razão de bloqueio fixa em BR = 0,5	96
Figura 4.14	Evolução temporal da pressão para diferentes razões de equivalência ($\Phi = 0,8; 1,0; 1,2$) no caso com razão de bloqueio BR= 0,5, com comparação aos dados de Jiang et al., 2024, sem obstáculos	98
Figura 4.15	Mapas de contorno de pressão com sobreposição da frente de chama para BR=0,5 e $\Phi=1,0$ nos instantes 1,56; 1,69; 1,82; e 2,08 ms	99
Figura 4.16	Mapas de contorno da magnitude da velocidade no plano médio para BR=0,5 e $\Phi = 1,0$, em cinco instantes (1,30; 1,56; 1,69; 1,82; 2,08 ms)	101
Figura 4.17	Distribuição da magnitude de vorticidade para BR = 0,5 e $\Phi = 1,0$	
Figura 4.18	nos instantes 1,30; 1,56; 1,69; 1,82; e 2,08 ms	103
	Velocidade máxima em função da razão de equivalência	106
Figura 4.19	Velocidade máxima em função da razão de equivalência para os dados experimentais de Jiang et al., 2024	106

Figura 4.20	Tempo de trânsito em função da razão de equivalência	108
-------------	--	-----

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1	Mecanismo de 19 passos para reação de hidrogênio-ar. [Wang et al., 2023]	26
Tabela 3.1	Parâmetros de entrada simulados	53
Tabela 3.2	Especificações das máquinas utilizadas para a simulação	58
Tabela 3.3	Valores da quantidade de nós e elementos para cada geometria	63
Tabela 3.4	Valores máximos e mínimos dos critérios de qualidade de malha para cada geometria gerada	66
Tabela 3.5	Valores utilizados na equação de Arrhenius	70
Tabela 3.6	Propriedades iniciais	74
Tabela 4.1	Velocidade para todos os casos simulados	104
Tabela 4.2	Velocidade máxima para o presente estudo em comparação com o estudo referência	109

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i> (Dinâmica de Fluidos Computacional)
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
CJ	Chapman-Jouguet
DDT	<i>Deflagration-to-Detonation Transition</i> (Transição de Deflagração para Detonação)
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i> (Simulação Numérica Direta)
KH	Kelvin–Helmholtz
LD	Landau–Darrieus
LES	<i>Large Eddy Simulation</i> (Simulação de Grandes Escalas)
PISO	<i>Pressure-Implicit with Splitting of Operators</i>
RANS	<i>Reynolds-Averaged Navier–Stokes</i> (Média de Reynolds das equações de Navier–Stokes)
RE	Razão de Equivalência
RM	Richtmyer–Meshkov
RT	Rayleigh–Taylor
SGS	<i>Sub-Grid Scale</i> (Submalha)
SIMPLE	<i>Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations</i>
SIMPLEC	<i>Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations – Consistent</i>
WALE	<i>Wall-Adapting Local Eddy-Viscosity</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Latinos

A	Área
A_{livre}	Área da seção transversal livre
A_{total}	Área da seção transversal onde não há obstáculos
A_m	Fator pré-exponencial
A, B	Constantes do modelo <i>Eddy Dissipation</i>
BR	Razão de bloqueio do duto
C_s	Coefficiente de Smagorinsky
d	Distância até a parede
D_t	Difusividade turbulenta
D	Coefficiente de difusão mássica
e	Energia interna específica
E	Energia total específica
Ea, m	Energia de ativação (lei de Arrhenius)
h	Entalpia específica
h_s	Entalpia sensível
J_i	Fluxo difusivo de massa da espécie i
k	Energia cinética turbulenta
$k_{f,m}$	Constante de velocidade (lei de Arrhenius)
k_{eff}	Condutividade térmica efetiva na equação de energia
L_s	Escala de comprimento de submalha usada no modelo de viscosidade turbulenta
Mw_i	Massa molar da espécie i
n	Expoente de temperatura na lei de Arrhenius
p	Pressão estática
q_i	Fluxo de calor
R	Constante universal dos gases
R_i	Termo fonte químico de espécies
$R_{i,r}$	Taxa de reação para a espécie i
Re_o	Número de Reynolds turbulento
r	Raio
S_L	Velocidade de chama laminar

S_T	Velocidade de queima/propagação turbulenta da chama
S_r	Velocidade turbulenta usada na lei de avanço radial
S_ϕ	Termo fonte
$ S , S_{ij}$	Módulo e componentes do tensor de taxa de deformação (LES)
t	Tempo
T	Temperatura
u_i, \vec{v}	Componentes da velocidade de Favre e vetor velocidade.
u'_0, l_0	Velocidade característica e escala integral da turbulência
V	Volume do elemento de controle
$V_{i,m}$	Velocidade difusiva de espécie
$x_{i,j}$	Coordenadas espaciais
Y_i	Fração mássica da espécie i

Símbolos Gregos

α	Largura de filtro LES
δ_{ij}	Delta de Kronecke
ε	Taxa de dissipação turbulenta
γ	Razão de calores específicos
λ	Condutividade térmica
ν	Viscosidade cinemática
ρ	Massa específica
σ_{ij}	Tensor de tensões viscosas
τ_{ij}	Tensor de tensões viscosas efetivas
Φ	Razão de equivalência da mistura
ϕ	Variável escalar genérica transportada
ω_m	Taxa de reação

1 INTRODUÇÃO

O domínio de conceitos relacionados à combustão tem sido um dos pilares do avanço tecnológico, impulsionando diversos ramos com sistemas cada vez mais modernos de energia, influenciando setores como de transporte, industrial, residencial, entre outros. A combustão, como fenômeno físico-químico de transformação de energia química em energia térmica e mecânica [Turns, 2013], desempenha um papel crucial em diversos setores industriais, sendo responsável por grande parte da matriz energética global. Contudo, com o avanço de pesquisas nesse segmento, novos desafios emergem, incluindo a busca por sistemas de combustão mais seguros, eficientes e ambientalmente sustentáveis. Nesse contexto, a combustão em sistemas confinados e suas complexidades dinâmicas tornaram-se objeto de investigação intensiva, dada sua relevância tanto para a otimização de processos quanto para a mitigação de riscos associados a falhas.

A combustão confinada é um fenômeno de grande relevância em diversas áreas da engenharia, com aplicações que abrangem tópicos como a propulsão aeroespacial, sistema de defesa, indo até sistemas de geração de energia e transporte de gases combustíveis. Em sistemas confinados, como dutos e câmaras de combustão, a propagação de uma frente de chama está diretamente influenciada por fatores geométricos, termodinâmicos, de cinética química e da dinâmica de propagação da onda. Entre os aspectos mais críticos dessa dinâmica, destaca-se a transição de deflagração para detonação, conhecida como DDT (*Deflagration-to-Detonation Transition*), que pode acarretar mudanças abruptas nos regimes de combustão, gerando efeitos que devem ser monitorados a fim de evitar situações com acidentes ou oferecendo potencial de otimização em sistemas de engenharia. Uma melhor compreensão desses comportamentos, pode influenciar em sistemas mais seguros e um uso mais eficiente de sistemas complexos.

A investigação dos efeitos que influenciam na propagação da frente de chama e a DDT pode fornecer *insights* para a otimização de sistemas de combustão confinados. A introdução de obstáculos, como barreiras, altera significativamente o escoamento e a dinâmica de combustão, influenciando parâmetros como velocidade da chama, distribuição de pressão e formação de instabilidades. A partir de análises numéricas busca-se identificar condições que favoreçam o controle do processo de combustão, minimizando riscos associados à transição para regimes de maior severidade, ao mesmo tempo em que se exploram estratégias para aprimorar a eficiência da queima. Esses *insights* podem ser aplicados ao desenvolvimento de

sistemas de combustão mais seguros e eficazes, otimizando a conversão de energia em motores de combustão (como *pulse detonation engine*) [Emami et al., 2015] e sistemas de transporte de combustíveis, além de contribuir para o avanço de tecnologias baseadas no uso do hidrogênio como vetor energético sustentável.

Os *Pulse Detonation Engines* são motores que geram empuxo por meio de detonações pulsadas de uma mistura combustível e oxidante. Diferem dos motores convencionais por utilizarem combustão supersônica, o que pode aumentar a eficiência termodinâmica e simplificar a estrutura mecânica, embora apresentem desafios de controle e resistência a altas pressões e temperaturas [Wintenberger e Shepherd, 2024].

Nos últimos anos, a busca por combustíveis limpos e eficientes tem impulsionado o interesse pelo hidrogênio, considerado um vetor energético promissor devido à sua ausência de emissões de dióxido de carbono quando utilizado como combustível [Emami et al., 2015]. As propriedades específicas do hidrogênio, como ampla faixa de inflamabilidade e alta difusividade, tornam seu manuseio particularmente desafiador, especialmente em sistemas confinados. Isso reforça a necessidade de estudos que compreendam detalhadamente os comportamentos de propagação de chamas e os fatores que levam à transição para detonação.

A geometria dos sistemas confinados é um dos fatores determinantes para a propagação de chamas. Alterações geométricas, como barreiras, gargalos ou restrições, podem acelerar significativamente a frente de chama, além de promover a formação de ondas de choque e favorecer a transição para detonação [Chen et al., 2016]. Compreender e mensurar a influência de fatores como esses, podem gerar um controle mais avançado de sistemas que façam uso deste princípio. No entanto, por se tratar de um problema de elevada complexidade, existe uma demanda por uma maior quantidade de estudos na área [Wang et al., 2022; Teodorczyk et al., 2009]. Embora diversos estudos tenham explorado combustão em dutos fechados, existe uma grande variedade de disposições de barreiras, gerando uma infinidade de combinações possíveis. Por conta da elevada complexidade em se modelar esse tipo de comportamento, mesmo replicando configurações similares ainda sim podem existir divergências de resultados. Por isso, expandir estudos nessa área podem contribuir significativamente com formas eficientes de realizar modelamentos numéricos, que por consequência podem gerar mais conhecimento e impactos reais em sistemas com esse tipo de funcionamento.

A modelagem numérica de escoamentos reativos apresenta desafios significativos devido à natureza altamente não linear do fenômeno em questão, que engloba interações

complexas entre ondas de choque (quando há chamas rápidas ou transição de deflagração para detonação), turbulência, obstáculos e reações químicas acopladas [Wang et al. 2022]. A precisão das simulações tem sido frequentemente questionada na literatura, uma vez que diferentes abordagens numéricas podem apresentar limitações na captura dos mecanismos críticos do processo [Heidari e Wen, 2014]. Outro fator que evidencia a complexidade da representação numérica desse fenômeno é o fato da propagação da frente de chama em dutos fechados com obstáculos é influenciada por múltiplos fatores. Os fatores podem ser diversos, como a ignição espontânea causada pela mistura turbulenta, entre produtos e reagentes, no espaço entre os obstáculos, o aumento da velocidade turbulenta de queima devido à interação chama-obstáculo, a interação da distorção da superfície da chama promovida pela interação chama-onda de choque e o desenvolvimento de instabilidades, como a de Richtmyer-Meshkov (RM) [Emami et al., 2015]. No entanto, ainda não há um consenso definitivo sobre qual desses mecanismos desempenha o papel dominante na propagação das ondas de combustão, tornando essencial o desenvolvimento de estudos mais detalhados para aprimorar a confiabilidade das simulações e a compreensão do fenômeno.

Além dos desafios inerentes à modelagem numérica desse problema, a origem e o papel dos vórtices na propagação da chama em sistemas confinados também permanecem questões em aberto na literatura, com diferentes estudos apresentando interpretações diferentes. Chen et al., 2016 argumentam que a formação dos vórtices é primariamente consequência da expansão dos produtos da combustão, que força a mistura não queimada a acelerar através do canal formado entre o obstáculo e a parede superior da câmara, Wang et al., 2022, destacam a interação entre ondas de choque e a frente de chama como um fator determinante para a aceleração da chama. Segundo Wang et al., 2022, a reflexão das ondas de choque nos obstáculos e nas paredes sólidas pode intensificar a instabilidade de Richtmyer-Meshkov, promovendo a deformação da superfície da chama e, conseqüentemente, alterando sua dinâmica de propagação. Esses conceitos demonstram a complexidade dos mecanismos envolvidos na combustão confinada e reforçam a necessidade de investigações mais detalhadas para esclarecer os processos físicos que governam a interação entre turbulência, ondas de choque e propagação da chama.

Outro aspecto que contribui para a complexidade na modelagem do presente estudo é a influência das dimensões espaciais e da turbulência não convencional sobre a propagação da chama. Estudos indicam que a taxa de crescimento das perturbações em sistemas

tridimensionais é significativamente maior do que em sistemas bidimensionais, mesmo quando as amplitudes iniciais das perturbações e os comprimentos de onda são idênticos [Anunchina et al., 2015]. Esse comportamento ressalta a importância de considerar os efeitos tridimensionais em simulações numéricas para obter previsões mais realistas do fenômeno.

Em contextos que tangem a DDT, a descrição da turbulência ainda apresenta lacunas teóricas. Enquanto modelos clássicos de submalha para grandes escalas (*Large Eddy Simulation* - LES) têm sido amplamente empregados para estudar escoamentos turbulentos, a turbulência observada no processo de DDT não segue necessariamente as premissas clássicas, tornando incerta a adequação de determinados modelos para capturar com precisão os mecanismos envolvidos [Emami et al., 2015]. Embora isso não implique que os modelos submalha convencionais sejam inadequados para investigar a aceleração da chama, evidencia a necessidade de abordagens aprimoradas para representar adequadamente os processos turbulentos atípicos que emergem nesse regime altamente dinâmico.

Os estudos de chamas se propagando em dutos fechados são realizados em sua maioria em duas configurações de seção transversal retangular e circular, ambas as disposições são apresentadas na Figura 1.1.

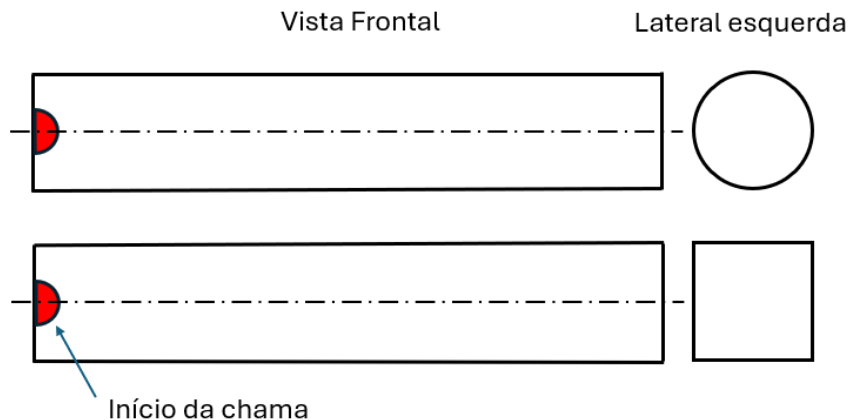


Figura 1.1 – Exemplo de dutos com diferentes seções transversais.

Quando incluídos os obstáculos, apesar de possuírem um mesmo princípio de estabelecimento de barreiras, a seção transversal influencia na dinâmica daquele escoamento. Esse princípio é observado na Figura 1.2 e evidencia a necessidade da utilização de sistemas de coordenadas condizentes com a geometria adotada na pesquisa, em casos de estudos bidimensionais, pois a dinâmica dos vórtices gerados é distinta para tipos de obstáculos diferentes.

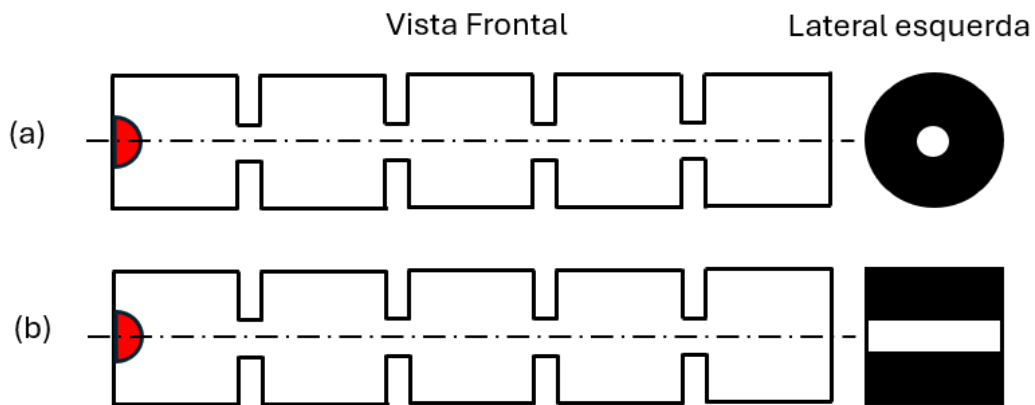


Figura 1.2 – Exemplo de dutos com diferentes seções transversais e mesmo princípio de obstáculos. (a) Duto com obstáculos tipo “anel”. (b) Duto com obstáculos tipo “parede”.

Além da seção transversal dos dutos, outro fator que diferencia os estudos é o tipo de obstáculo incluído. O intuito dos obstáculos é gerar uma razão de bloqueio (*blockage ratio* - BR) que por consequência acelera a frente de chama através de promoção da turbulência e do aumento da superfície da chama [Karanam et al., 2018]. Contudo a razão de bloqueio não é o único parâmetro dos obstáculos que influencia nessa aceleração, mas também o tipo de obstáculo, seu tamanho, sua quantidade, e sua disposição no duto. Nesse ponto, diversos estudos se dividem explorando diferentes configurações de barreiras a fim de aferir a influência na velocidade de frente de chama, até mesmo podendo chegar na DDT. O formato e tipo do obstáculo podem gerar zonas de recirculação, ondas de choque diferentes e ter impactos diversificados na turbulência [Wang et al., 2023]. Determinadas formas de obstáculos que podem propiciar maior intensidade de turbulência, influenciando na reação e posteriormente acelerando a frente de chama, ou acelerar a formação de ondas de choque que terão um papel importante na DDT. Alguns exemplos de diferentes tipos de obstáculos são apresentados na Figura 1.3. Embora não exista um consenso da nomenclatura para cada tipo de obstáculo, o presente estudo nomeou-os de forma própria.

As disposições de obstáculos mais estudadas podem adotar formas de tipo “parede” ou de tipo “anel” a depender da seção transversal. Esses dois exemplos estão apresentados na Figura 1.2. Muito similar a disposição de “parede”, existem casos em que são posicionados os obstáculos de forma unilateral, em ângulos diferentes de 90°, ou de forma alternada. Essas configurações são apresentadas na Figura 1.3.

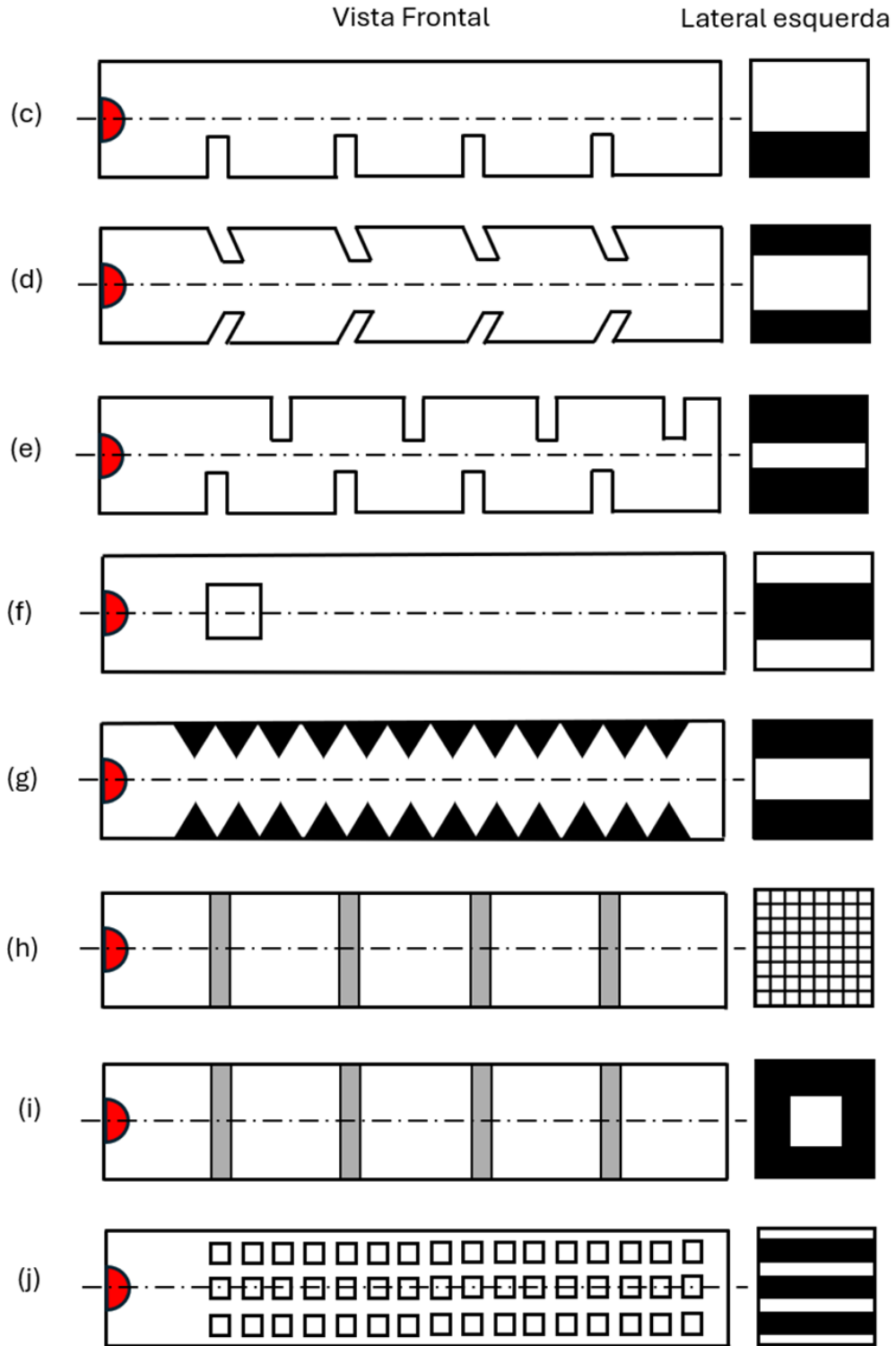


Figura 1.3 – Exemplos de dutos com diferentes tipos de obstáculos. (c) Duto com obstáculos tipo “degrau”. (d) Duto com obstáculos tipo “parede angular”. (e) Duto com obstáculos tipo “parede alternada”. (f) Duto com obstáculos tipo “Pilar”. (g) Duto com obstáculos tipo “rugoso”. (h) Duto com obstáculos tipo “grade”. (i) Duto com obstáculo tipo “vão”. (j) Duto com obstáculo tipo “matriz”.

A presente dissertação tem como intuito investigar e contribuir, por meio de simulação numérica no software ANSYS Fluent, os efeitos de barreiras geométricas em um duto de seção retangular contendo hidrogênio e ar pré-misturados. O sistema estudado consiste em um duto fechado com uma única barreira que reduz a seção transversal em um ponto determinado, configurando uma geometria que influencia diretamente o comportamento da chama. A ignição é promovida por uma fagulha controlada. A análise numérica foca na variação da razão de bloqueio das barreiras e na variação da razão de equivalência da mistura, mensurando assim os impactos na velocidade da frente de chama.

Este trabalho contribui para o avanço do conhecimento sobre combustão confinada, fornecendo dados numéricos que ajudam a compreender o impacto de barreiras geométricas na dinâmica da chama. Do ponto de vista prático, os resultados têm implicações diretas na segurança de sistemas industriais que utilizam hidrogênio e em projetos de sistemas de combustão mais eficientes e controlados.

O estudo efetuou uma revisão bibliográfica a fim de identificar lacunas e oportunidades de contribuir para a área de interesse. Realizada a análise, foi gerada uma geometria padrão de um duto com e sem barreiras em seu interior no software Solid Edge. Essa geometria foi importada ao software ANSYS e nele foram geradas malhas adequadas a física do problema. Feito isso, o ANSYS Fluent foi utilizado para realizar a simulação numérica do problema. Adotando o modelo LES, e a submalha Smagorinsky-Lilly, foi gerado o comportamento reativo da queima de uma mistura de hidrogênio e ar dentro do duto fechado inicialmente sem obstáculos. Os resultados do formato da chama gerados na simulação foram comparados com dados experimentais de um artigo disponível na literatura. Além da comparação qualitativa foi efetuada uma validação quantitativa. Uma análise de malha foi realizada. Obtendo a confiabilidade no modelo foram conduzidas simulações com obstáculos considerando diferentes razões de bloqueio e diferentes razões de equivalência.

1.1 Motivação

A compreensão dos mecanismos relacionados a propagação de chamas em meios confinados permanece como um tema fundamental dentro dos estudos na área de combustão. Embora o problema específico abordado na presente pesquisa ainda não se traduza imediatamente em aplicações industriais consolidadas, ele representa um passo relevante no aprofundamento do entendimento básico necessário para o avanço de tecnologias futuras.

Estudos dessa natureza compõem o arcabouço científico que possibilitará, em médio e longo prazo, o desenvolvimento de sistemas de combustão mais eficientes, seguros e ambientalmente responsáveis.

A motivação principal para a investigação repousa no crescente interesse no hidrogênio como vetor energético. Considerado um dos candidatos mais promissores à estruturação de matrizes energéticas de baixo carbono, o hidrogênio vem se destacando como alternativa. Sua adoção em larga escala depende de um refinamento contínuo do conhecimento acerca de seu comportamento em condições diversas de escoamento e combustão. Nesse contexto, compreender como barreiras, obstáculos e geometrias confinadas influenciam a aceleração da chama e os níveis de pressão é um passo decisivo para futuras aplicações práticas, tanto em sistemas intencionais de combustão quanto em situações de risco associadas ao seu manuseio.

A atualidade do problema é reforçada pela intensa produção científica recente sobre combustão confinada de hidrogênio, como evidenciado por estudos experimentais e numéricos usados como referência para a presente pesquisa, como as pesquisas de Jiang et al., 2024. Pesquisas desse tipo demonstram que a interação entre frente de chama, obstáculos e campo de escoamento turbulento pode produzir fenômenos complexos de aceleração, distorção geométrica da frente e amplificação de ondas de pressão, frequentemente associados à transição de deflagração para detonação (DDT). Esses efeitos, ainda que estudados majoritariamente sob perspectiva acadêmica, têm implicações diretas para futuras normas de segurança, projetos de dutos e câmaras de combustão operando com hidrogênio ou misturas reativas de características semelhantes.

Além do fator energético e tecnológico, a motivação deste estudo se fortalece pelo caráter intrinsecamente interdisciplinar do problema. O comportamento de chamas turbulentas pré-misturadas envolve a interseção de campos clássicos da engenharia, como termodinâmica, cinética química, mecânica dos fluidos, transferência de calor e massa, além de conceitos de instabilidades hidrodinâmicas e de regimes de combustão que se desdobram em escalas de tempo e espaço de baixa magnitude.

Assim, mesmo que o escopo deste trabalho se concentre em um problema de caráter ainda fundamental, sua relevância científica se manifesta tanto no aprofundamento dos mecanismos físicos envolvidos quanto na criação de bases teóricas e numéricas para estudos futuros de maior complexidade e aplicabilidade.

1.2 Revisão Bibliográfica

A fim de identificar oportunidades de contribuir para a área de interesse, uma revisão do estado da arte foi realizada abrangendo estudos numéricos e experimentais. Essa revisão bibliográfica levou em consideração tanto estudos com geometrias diversificadas, combustíveis diferentes do hidrogênio, oxidantes diferentes (como ar e oxigênio), modelos de turbulência diferentes, diferentes razões de bloqueio, entre outras especificações variadas.

Em estudos com dutos fechados com misturas reativas e obstáculos existem diversos fatores de interesse que influenciam nos resultados da velocidade da frente de chama. O combustível utilizado é um fator de suma importância. A geometria e a disposição dos obstáculos é outro fator que deve ser ponderado. Os obstáculos são classificados pela razão de bloqueio (BR), que indica a razão entre a área obstruída e a área total da seção transversal do duto. A equação que descreve os valores para a razão de bloqueio é representada da seguinte forma:

$$BR = 1 - \frac{A_{livre}}{A_{total}} \quad (1.1)$$

onde A_{livre} representa a área da seção transversal na região de menor valor (onde está localizado o obstáculo), já A_{total} é a área da seção transversal nas regiões onde não há obstáculos.

Valores superiores para BR tendem a possuir maiores acelerações de velocidade de frente de chama, tal fator é primordial para que se alcance a DDT num comprimento determinado. O modelo de turbulência pode afetar os resultados também, sendo esse detalhe a ser monitorado. Por fim, apesar do BR ser extremamente relevante, o formato do obstáculo pode também propiciar maior intensidade de turbulência ou ondas de choque que aceleram a propagação de chama. Com o intuito de se ter uma visão mais ampla e clara por meio de tabelas, foi gerada uma tabela listando os estudos analisados, essa tabela encontra-se disponível no Apêndice B.

Nguyen et al., 2020, obtiveram resultados a partir de simulações numéricas no ANSYS Fluent com uma geometria bidimensional de seção transversal retangular. Os obstáculos utilizados foram de tipo “pilar” com geometrias diversificadas como quadradas, hexagonais e circulares para avaliar efeitos geométricos na propagação da chama. Além do uso de obstáculos diversificados foram utilizados modelos de turbulência diferentes (RANS e LES). Para os modelos de turbulência RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) foram usados os modelos

de turbulência $k - \varepsilon$ e $k - \omega$. Já para o LES foi adotado a submalha Smagorinsky-Lilly, com o uso de um atalho numérico para simulações LES bidimensionais. Esse atalho numérico é descrito nos estudos de Ibrahim et al., 2006. Como combustível foi considerada uma mistura de metano e ar com diferentes razões de equivalência e um mecanismo de 2 passos. Os obstáculos quadrados maximizaram a propagação da chama pela sua eficiência promovendo a turbulência. Apesar de se tratar de uma simulação bidimensional e com um combustível diferente do analisado na presente dissertação, as observações referentes a formas de otimizar a turbulência se fazem de extrema utilidade. Além desse fator, as simulações em LES foram mais eficientes em capturar o enrugamento da chama.

Similar a Nguyen et al., 2020, os estudos de Chen et al., 2016 utilizaram uma mistura de metano-ar como combustível, porém apenas na proporção estequiométrica. Foram realizadas simulações numéricas com geometrias tridimensionais e posteriormente validadas com testes experimentais. As simulações foram conduzidas no software ANSYS Fluent. O modelo de turbulência adotado foi o LES e submalha Smagorinsky-Lilly. A razão de bloqueio foi gerada com um obstáculo tipo “degrau” posicionado unilateralmente nos valores equivalentes a 0,3; 0,5 e 0,7. Esse formato de obstáculo gerou zonas de recirculação que favoreceram a propagação da chama. O modelo utilizado demonstrou boa concordância com os dados experimentais. A BR equivalente a 0,7 geraram velocidades de chama e taxas de crescimento de pressão mais elevadas quando comparadas com as demais.

Divergente dos demais estudos, Mei et al., 2022, não utilizaram obstáculos para intensificar a turbulência e por consequência impactar na velocidade da frente de chama, mas utilizou dutos de seção circular com curvaturas. Seu estudo se concentrou no uso do ANSYS Fluent de forma tridimensional. Análises numéricas e validação experimental foram conduzidas e como combustível foi utilizado uma mistura de hidrogênio-ar. O modelo adotado para a turbulência foi o LES e uma submalha inclusa em um modelo de superfície de chama (*Flame Surface Density*). As curvaturas se demonstraram um método eficiente para aumentar a turbulência e pressão, ambos fatores aceleraram a chama devido a interação entre ondas de compressão e reflexão. As ondas de compressão e reflexão se diferenciam pelo fato da refletida ser gerada pela perturbação induzida pela incidência em obstáculos. Desta forma, faz-se evidente que elevar a turbulência e pressão, são fatores primordiais para elevar a velocidade da frente de chama.

Mei. et al., 2023 geraram uma geometria tridimensional no SolidWorks e que posteriormente foi implementada no ANSYS Fluent. Os parâmetros para a realização da simulação foram os mesmos adotados em Mei et al., 2022. A geometria utilizada nesse estudo foi um duto seção transversal retangular com obstáculos tipo “grade” e tipo “pilar”, gerando uma razão de bloqueio equivalente a 0,2; 0,4; 0,6 e 0,8. O combustível e oxidante adotados foram uma mistura de hidrogênio-ar (hidrogênio de 0,3 em fração molar). O estudo em questão observou que aumentos na razão de bloqueio promovem maiores instabilidades no campo de escoamento e maior aceleração da chama.

Wang, S. et al., 2023a, efetuaram uma análise numérica bidimensional utilizando o ANSYS Fluent com diferentes BR (0,375; 0,5625; e 0,75) a fim de identificar a influência desse parâmetro na definição de padrões únicos nas chamas formadas pela queima do combustível. O modelo de turbulência adotado foi o RNG $k - \varepsilon$ com a interação química-turbulência modelada com o EDC (*Eddy Dissipation Concept*) e um método de resolução SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*). Os obstáculos investigados foram o tipo “pilar”, contendo 9 “pilares” posicionados trios em 3 posições espaçados com 100mm de distância entre eles. O combustível usado foi uma mistura com 20% de hidrogênio e 80% de metano, já o oxidante foi o ar em uma mistura estequiométrica. Os resultados foram validados com testes experimentais. O estudo indicou que a velocidade máxima da chama pode ser elevada a 5 vezes com a presença de obstáculos.

Os estudos anteriores foram ampliados por Wang, S. et al., 2023b, fazendo uso do mesmo *setup* dos utilizados em Wang, S. et al., 2023a. A geometria utilizada nesse estudo fez uso apenas de um trio de obstáculos, posicionado a 100mm do ponto de ignição. Nesse estudo foi utilizado apenas uma razão de bloqueio equivalente a 0,5. Diferente do estudo anterior, a mistura combustível oxidante foi o hidrogênio-ar estequiométrico com um mecanismo de 19 passos.

Gaathaug et al., 2012, assim como os demais estudos, efetuaram análises numéricas bidimensionais com validação experimental. Para as simulações foi desenvolvido um código FLIC que inclui a equação de conservação de energia cinética turbulenta. O combustível utilizado nesse caso foi uma mistura de hidrogênio-ar (hidrogênio variando de 15% a 35%). Foi utilizado o obstáculo tipo “parede” posicionado a 1 m da ignição que gerou uma razão de bloqueio variando de 0,5 a 0,9 em um duto de seção retangular. Ondas de detonação e formação de explosões locais foram levadas em consideração e analisadas. O duto possuía um

comprimento de 3 metros e a DDT foi alcançada a uma distância entre 1,2 e 2,0 m da fonte de ignição. A DDT foi fator crucial para a formação de ondas de detonação, que não foram observadas nos experimentos com sua ausência. Levando em consideração os demais estudos apresentados, faz-se evidente que a inclusão de obstáculos propicia que a DDT seja alcançada mais rapidamente e a consideração de mais obstáculos podem gerar velocidade de frente de chama ainda mais elevadas.

Silvestrini et al., 2008, realizaram experimentos com diversos combustíveis diferentes incluindo misturas de hidrogênio-ar, etileno-ar, metano-ar e acetileno-ar. A geometria utilizada possuía seção transversal circular com anéis que atuam na redução da área da seção transversal. Foram utilizados tubos de diferentes diâmetros e diferentes razões de bloqueio (variando entre 0,02 e 0,059). O estudo identificou uma correlação entre a razão de bloqueio e a distância até a DDT. Além dessa correlação, foi identificado que a DDT para a mistura hidrogênio-ar foi de 5 a 10 vezes menor que a de metano-ar.

Johansen e Ciccarelli, 2010, em seu estudo utilizaram o método de modelagem de turbulência LES e a submalha Smagorinsky–Lilly no software ANSYS Fluent com o método de resolução SIMPLE. O combustível utilizado foi uma mistura de metano-ar em dutos bidimensionais e tridimensionais de seção quadrada. Os obstáculos utilizados foram barreiras (tipo “parede”) com razões de bloqueio equivalentes a 0,3; 0,5 e 0,67. Essa configuração de obstáculos como visto em outros estudos, propicia zonas de recirculação gerando vórtices que podem ser benéficos para atingir a transição para detonação numa distância menor. O estudo aferiu que essa disposição de obstáculos propiciou uma aceleração da chama e do escoamento de gases não queimados.

Wang et al., 2022, realizaram simulações numéricas no software de código aberto OpenFOAM, adotando uma geometria bidimensional de seção transversal retangular e introduzindo até seis conjuntos de obstáculos do tipo “parede” com diferentes configurações de distribuição, sendo elas distanciadas a 300 mm cada, porém mantendo uma razão de bloqueio de 0,6. O modelo de turbulência utilizado foi o RANS, especificamente o $k - \omega$ SST. Para a resolução numérica, foi utilizado o método de resolução PISO (*Pressure-Implicit with Splitting of Operators*). A mistura combustível-oxidante era composta de hidrogênio e ar, com 30% de hidrogênio em fração volumétrica, em condições inicialmente homogêneas. O estudo apontou que a disposição simétrica dos obstáculos resultou em uma menor DDT, evidenciando o impacto decisivo da configuração geométrica na aceleração da chama.

Wang et al., 2023, por meio do OpenFOAM, realizaram simulações numéricas em um duto bidimensional de seção transversal retangular, de forma semelhante a seus trabalhos anteriores que também focaram em chamas em mistura hidrogênio-ar. Neste estudo, diferentemente de seus estudos passados com obstáculos sólidos, optou-se pela adoção de “obstáculos fluidos”, injetando gases em altas velocidades (como nitrogênio ou a própria mistura reativa de hidrogênio-ar) através de orifícios dispostos ao longo do duto. A modelagem turbulenta foi conduzida via abordagem RANS, com o modelo de turbulência $k - \omega$ SST, enquanto o método PISO foi utilizado para a resolução das equações de Navier-Stokes compressíveis em regime transiente. Mesmo sem uma razão de bloqueio fixa como nos obstáculos sólidos, avaliou-se a “razão de bloqueio virtual” produzida pela deflexão dos jatos fluidos. Os efeitos de diluição pela injeção de gases inertes possuem efeito secundário em relação ao bloqueio virtual. As comparações incluíram diferentes velocidades de injeção e composição de gases (inertes ou reativos), evidenciando que jatos fluidos reativos podem promover maior aceleração da chama e antecipar a DDT quando comparados a jatos inertes. O estudo concluiu que o uso de obstáculos fluidos não apenas reduz as perdas de pressão ao longo do duto, mas também antecipa o ponto de DDT em relação aos obstáculos sólidos de mesma obstrução efetiva, mostrando que não apenas obstáculos sólidos podem promover uma redução na distância até a DDT.

As simulações numéricas de Xu et al., 2022. foram feitas no ANSYS Fluent de forma bidimensional para investigar explosões de hidrogênio-ar em um duto de seção transversal retangular. Nesse estudo, foram inseridos obstáculos triangulares a distância de 0,025 m da ignição para avaliar seus efeitos na propagação de chamas. As simulações foram conduzidas adotando a metodologia RANS acoplado a uma abordagem de chama pré-misturada (modelo de Zimont) para descrever a turbulência e o comportamento da chama, enquanto o esquema SIMPLEC (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations - Consistent*) foi empregado como método de resolução. A razão de bloqueio foi variada de 0,2 a 0,55, e o combustível-oxidante usado foi hidrogênio-ar estequiométrico. As análises indicaram que as interações entre chama, campo de escoamento e obstáculos levam a um aumento da velocidade de frente de chama. A inclusão de mais de um obstáculo intensificou a turbulência e contribuiu para uma maior aceleração da chama.

Sheng et al., 2023, fizeram uso do ANSYS Fluent para simulações numéricas 3D adotando o LES e diferentes modelos de chama enrugada com o método de resolução PISO.

Para a simulação do processo de combustão, foram implementadas equações de variável de progresso em conjunto com um modelo de espessamento de chama e fatores de enrugamento. As geometrias de teste consistiam em um duto de seção retangular, no qual se inseriram arranjos distintos de obstáculos posicionados a 102,5mm da ignição, com a mesma razão de bloqueio (equivalente a 0,5). A mistura combustível usada foi o hidrogênio e ar, com concentração de hidrogênio de 35% em volume. Foi observado que a posição dos obstáculos impactava significativamente a intensidade da turbulência, a forma da chama e a sobrepressão. O obstáculo tipo “pilar” apresentou uma velocidade de frente de chama superior aos demais obstáculos simulados.

Karanam et al., 2018, realizaram estudos numéricos no software OpenFOAM, adotando uma geometria bidimensional de seção retangular para investigar a propagação de chamas em misturas de hidrogênio-ar (com 22,5% de hidrogênio), tanto em canais lisos quanto em canais com obstáculos do tipo “parede” com razões de bloqueio de 30% e 60%. Foram inseridos 7 obstáculos igualmente espaçados entre eles, sendo o primeiro 0,25m da ignição. O modelo de turbulência utilizado foi o RANS $k - \omega$ SST, e o método de resolução PISO. Como conclusão, observou-se que a introdução de obstáculos intensificou a aceleração da chama, facilitando DDT.

Liu et al., 2023, conduziram estudos experimentais e simulações bidimensionais das equações de Navier–Stokes compressíveis para avaliar a aceleração de chama e a DDT em um duto de seção retangular obstruído com obstáculos do tipo “rugoso” e tipo “parede”. Os obstáculos tipo “parede” foram distribuídos a uma distância de 0,29 cm entre eles. A resolução numérica baseou-se em um método Godunov de alta ordem, aliado a um modelo reativo de passo único. O canal de teste possuía 30 cm de comprimento e 2 cm de altura, e diferentes razões de bloqueio (25%, 50%, 75% e 90%). Observou-se que, para baixos valores de bloqueio, as superfícies inclinadas dos obstáculos triangulares (tipo “rugoso”) favorecem maior enrugamento da chama e sobrevivência de detonações locais, encurtando o percurso até a DDT. Entretanto, para razões de bloqueio elevadas, as arestas inclinadas aumentam a difração de ondas de choque e dificultam a transição para a detonação, tornando o arranjo retangular mais efetivo em alcançar DDT por meio de ondas de Mach refletidas nos vértices dos obstáculos.

Xiao e Oran, 2020, realizaram simulações numéricas bidimensionais em um duto de seção transversal retangular, empregando um código próprio baseado nas equações de Navier-Stokes totalmente compressíveis com um esquema WENO de terceira ordem e malha

adaptativa. Os obstáculos examinados foram do tipo “matriz”, porém com diferentes geometrias (circulares, quadradas e triangulares) e razões de bloqueio (variando de 0,33 a 0,67) para avaliar o impacto da forma e do grau de obstrução na aceleração de chamas e na DDT. O combustível adotado foi hidrogênio em mistura estequiométrica com ar, utilizando-se um modelo químico-difusivo. Os resultados evidenciaram que maiores valores de BR e obstáculos com cantos vivos (como quadrados e triangulares) promoveram aceleração mais intensa da chama e anteciparam a DDT, enquanto os obstáculos circulares apresentaram menor interação com o escoamento, retardando o processo de transição para detonação. Concluiu-se que tanto a razão de bloqueio quanto o formato do obstáculo são fatores críticos para a velocidade de frente de chama e a possibilidade de ocorrência de DDT.

Li et al., 2022, realizaram simulações numéricas em 2D para investigar a influência da disposição dos obstáculos e a razão de bloqueio na aceleração de chamas e na DDT em misturas estequiométricas de hidrogênio-ar em um duto de seção retangular. Para isso, foi utilizado um método de alta ordem com refinamento de malha, resolvendo as equações de Navier-Stokes com um modelo de cinética química de um passo. Os obstáculos utilizados estavam dispostos na configuração de matriz com obstáculos cilíndricos. Diferentes configurações de arranjo foram comparadas, todas com a mesma BR (50%). Posteriormente, foram analisados também diferentes valores de razão de bloqueio (33%, 50% e 67%). O estudo revelou que, na configuração escalonado, as colisões frontais entre a chama e os obstáculos intensificam a superfície de chama e facilitam a ocorrência de DDT, reduzindo o tempo para sua formação. Contudo, obstáculos muito congestionados (BR de 67%) podem dificultar a formação de detonações ao reduzir o foco de choque (*shock focusing*) necessário para iniciar a detonação, que é gerado pelo aumento de choques por convergência e colisão de ondas, ocasionando o aumento de pontos quentes (*hot spots*).

Posteriormente, Li e Xiao, 2024, realizaram simulações bidimensionais das equações de Navier–Stokes, empregando um método numérico de alta ordem (WENO de 3ª ordem) e um modelo químico-difusivo de etapa única para investigar a ocorrência de DDT em um duto com obstáculos tipo “matriz” de forma circular, muito similar aos estudos de Li et al., 2022. Foram investigados os parâmetros de maior influência, como o espaçamento entre cada obstáculo cilíndrico. Nessa configuração, a mistura combustível-oxidante utilizada foi hidrogênio–ar estequiométrico. Os resultados foram comparados com dados experimentais e o modelo apresentou boa concordância com os experimentos.

Goodwin et al., 2016, realizaram simulações numéricas bidimensionais e tridimensionais, resolvendo diretamente as equações de Navier-Stokes reativas por meio de um esquema de alta ordem e malha adaptativa. A geometria escolhida foi de seção transversal retangular, contendo obstáculos do tipo “parede” distribuídos a uma distância de 0,64 cm entre eles e 0,28 cm da ignição, com razões de bloqueio variando de 0,05 a 0,8, a fim de investigar o efeito dessas variações na transição de deflagração para detonação. A mistura combustível-oxidante utilizada foi etileno-oxigênio em proporção estequiométrica, inicialmente à pressão atmosférica. Notou-se que, para maiores valores de BR, a aceleração de chama e a formação de frentes de detonação são majoritariamente guiadas por gradientes de reatividade induzidos por reflexões de ondas de choque, enquanto para menores razões de bloqueio o mecanismo de DDT ocorre sobretudo por uma rápida injeção de energia em regiões determinadas, resultante de colisões sucessivas de ondas de choque.

Li et al., 2022, conduziram experimentos em um duto retangular com 300 mm de comprimento e seção transversal de 20×20 mm, equipado com obstáculos tipo “rugoso” triangulares contínuos (de razão de bloqueio de 0,3) para investigar a aceleração de chamas e a transição deflagração-detonação em misturas de hidrogênio e oxigênio. Foram conduzidos testes variando a razão de equivalência de 0,25 a 3,0. Observou-se que a presença dos obstáculos triangulares gera forte intensificação no processo de aceleração da chama, resultando em uma DDT antecipada.

Gamezo et al., 2007, realizaram simulações numéricas bidimensionais e tridimensionais de escoamentos reativos, resolvendo diretamente as equações de Navier-Stokes totalmente compressíveis e acopladas a um modelo de cinética química global (baseado em um mecanismo cinético de um passo). A geometria consistiu em dutos de seções retangulares, bidimensionais e tridimensionais, com obstáculos (razão de bloqueio de 0,5) tipo “parede”, com espaçamentos de 4 cm entre eles, sendo o primeiro localizado a 2 cm do ponto de ignição. O combustível-oxidante empregado foi hidrogênio-ar estequiométrico. A presença de obstáculos promoveu instabilidades (Kelvin-Helmholtz, Rayleigh-Taylor e Richtmyer-Meshkov) e interações de chama-vórtice, que elevaram a área superficial da chama e a taxa de liberação de calor, acelerando-a de forma significativa.

Gamezo et al., 2008, realizaram simulações numéricas bidimensionais resolvendo as equações de Navier-Stokes com um modelo de cinética de um passo. O método empregado para a discretização foi do tipo Godunov, modificado para capturar ondas de choque em uma

malha adaptativa. O duto estudado tinha geometria bidimensional e incluía obstáculos tipo “parede” variando o espaçamento entre eles, mantendo uma razão de bloqueio de 0,5. A mistura combustível-oxidante foi hidrogênio-ar estequiométrico em condições atmosféricas iniciais. As simulações indicaram que o espaçamento entre obstáculos exerce papel determinante na formação de estruturas de ondas de choque e o surgimento da DDT. Os espaçamentos maiores favoreceram a formação dessas estruturas e, conseqüentemente, a ignição de detonações ao colidirem com os obstáculos, enquanto espaçamentos muito pequenos intensificaram a turbulência, mas nem sempre resultaram em DDT, pois a ausência das estruturas de recirculação dificulta o acoplamento entre a frente de chama e a onda de choque.

Lu et al., 2022, realizaram simulações numéricas bidimensionais, resolvendo as equações de Navier-Stokes compressíveis acopladas a um modelo químico-difusivo paramétrico. Esse modelo é composto por uma equação global de uma etapa na qual a conversão reagente para produto é descrita pela taxa da equação de Arrhenius única. O estudo focou em dutos de seção retangular com arranjos periódicos de obstáculos tipo “parede” para avaliar a aceleração de chamas, a transição de deflagração para detonação e a propagação de ondas de detonação em misturas estequiométricas de hidrogênio-ar. Concluiu-se que a modelagem que incorpora o ajuste experimental fornece previsões mais consistentes nos diferentes regimes de propagação.

Shen et al., 2019, efetuaram um estudo experimental em um duto confinado, com seção transversal quadrada (25 mm x 25 mm) e comprimento total de 300 mm, sem a presença de obstáculos. A investigação foi conduzida por meio de visualizações Schlieren de alta velocidade. A mistura combustível-oxidante consistiu em hidrogênio-ar em proporção estequiométrica, analisada sob diferentes pressões iniciais (variando de 0,3 a 1,5 atm). O estudo concluiu que a instabilidade de Rayleigh-Taylor, somada à interação chama-onda de pressão, foi determinante para o surgimento de formas de chama do tipo “tulipa” e suas inversões, além de influenciar diretamente a velocidade de frente de chama ao longo do duto. Embora não tenha sido alcançada a DDT, observou-se que o aumento da pressão inicial intensificou o enrugamento da chama e favoreceu velocidades de propagação mais elevadas.

Cross e Ciccarelli, 2015, desenvolveram um estudo experimental em um duto cilíndrico tridimensional de 6,1 m de comprimento e 0,1 m de diâmetro com placas de orifício (obstáculos tipo “anel”) atuando como obstáculos, apresentando razão de bloqueio de 0,44 e espaçadas na distância de um diâmetro do duto. As misturas examinadas foram hidrogênio-ar e etileno-ar em

diversas faixas de concentração, todas à pressão atmosférica. O principal resultado obtido apontou que, nessas condições, a presença dos obstáculos com 44% de bloqueio apresentou forte propensão transição para a detonação.

Teodorczyk et al., 2009, realizaram estudos experimentais em um duto de seção retangular (0,11 m de largura por 0,08 m de altura e comprimento total de 2,0 m), obstruído com obstáculos fixados na parede inferior em diferentes alturas, correspondendo a razões de bloqueio de 0,25; 0,5 e 0,75. A mistura combustível-oxidante testada consistiu em hidrogênio-ar nas proporções equivalentes a 0,6; 0,8 e 1,0 (em termos de razão de equivalência), sendo avaliada a influência da variação da altura dos obstáculos e do espaçamento entre eles na deflagração turbulenta e na eventual transição para detonação. As conclusões evidenciaram que os obstáculos com valor da BR intermediária e espaçamento ótimo promoveram maior probabilidade de ocorrência da DDT, enquanto obstáculos com razão de bloqueio muito elevada intensificaram as perdas de momento e inibiram a transição para detonação, resultando apenas em chamas turbulentas de alta velocidade.

Jiang et al., 2024, realizaram uma investigação experimental e numérica em um duto tridimensional (50 mm x 50 mm x 323 mm) fechado, com obstáculo tipo “degrau” (espessura de 10 mm) instalada em diferentes posições e razões de bloqueio (0,3; 0,5; e 0,7) para estudar a evolução da chama e a dinâmica de pressão de misturas hidrogênio-ar. Nesse estudo, o ANSYS Fluent foi utilizado com a formulação LES e um modelo de velocidade turbulenta de chama (Zimont). Foram fixadas condições adiabáticas e um passo de tempo ditado por um critério de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), a fim de capturar ondas de pressão no interior do duto. Os resultados mostraram que a chama, a interação chama-vórtice e o escoamento de recirculação atrás do obstáculo aceleram drasticamente a frente de chama e elevam o sobrepressão no interior do duto. Quanto maior a BR e a distância do obstáculo, mais intensa a turbulência e maiores os valores de sobrepressão e de velocidade da frente de chama.

Emami et al., 2015, realizaram simulações numéricas 2D de uma mistura estequiométrica hidrogênio-ar ao longo de um duto com obstáculos tipo “parede” (BR equivalente a 0,5) distribuídos a uma distância d (equivalente a altura e largura do duto) e a $d/2$ da ignição, empregando o LES com o modelo de chama artificialmente espessada (*Artificially Thickened Flame* - ATF) e detalhamento cinético baseado em 27 reações passos. Para reduzir o custo computacional relacionado à cinética detalhada, foi adotado o esquema *In Situ Adaptive Tabulation* (ISAT). Esse modelo foi codificado na plataforma OpenFOAM, resolvendo as

equações de Navier-Stokes compressíveis filtradas para escoamentos reativos, enquanto a modelagem de submalha da turbulência foi feita pelo próprio espessamento de chama e à função de eficiência acoplada. Dessa forma, a simulação foi capaz de resolver malhas relativamente grossas. Na fase inicial, a interação entre a chama e os vórtices gerados pelo escoamento em torno dos obstáculos promoveu o enrugamento da frente de chama (por instabilidade de Kelvin–Helmholtz), aumentando a superfície de reação e a taxa de liberação de energia. Na fase de alta velocidade, a interação onda de choque–chama (associada à geração de vorticidade baroclínica e instabilidade de Richtmyer–Meshkov) foi o mecanismo dominante para sustentar a aceleração até a detonação. O uso de cinética detalhada permitiu a representação mais adequada dos tempos de indução química, influenciando a formação de zonas de calor responsáveis pela ignição local e transição final para a detonação. Essa pesquisa destacou a importância das interações entre vórtices e ondas de choque e a necessidade de um modelo de cinética química detalhado que capture os fenômenos envolvidos.

Feita a revisão do estado da arte, se faz evidente a diversificação dos estudos que envolvem velocidade de frente de chama em dutos confinados. A partir do Apêndice B se faz evidente que apenas dois artigos possuem as mesmas especificidades do presente estudo. As especificidades são classificadas como sendo um estudo que possui hidrogênio-ar como mistura, obstáculo tipo “degrau”, simulações 3D, aplicação de modelagem LES, e por fim, seção retangular. Os únicos estudos que possuem essas configurações são os de Jiang et al., 2024, e o de Sheng et al., 2023.

A partir da revisão da literatura, fica evidente a influência notória da inclusão de barreiras em dutos na velocidade da frente de chama, e a transição deflagração-detonação em determinadas condições. Todos os estudos apresentados contribuem para a compreensão desse fenômeno. Embora seja um fenômeno de elevada complexidade, existem padrões claros e indícios de zonas de interesse para avançar nas pesquisas dessa área e fazem-se necessários para ampliar a clareza para o tema. Desta forma faz-se evidente a necessidade da realização de mais estudos e pesquisas explorando geometrias tridimensionais que possuam variação não apenas da razão de bloqueio, mas também na razão de equivalência.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo geral

O presente estudo possui como objetivo geral estudar através de modelos tridimensionais a propagação de chamas pré-misturadas de hidrogênio – ar em um duto fechado, considerando um obstáculo, aplicando modelos de grandes escalas e avaliando o efeito da razão de bloqueio e da razão de equivalência.

1.3.2 Objetivos específicos

Para a presente pesquisa foram propostos os seguintes objetivos específicos:

- a) Implementar modelos de combustão adequados para misturas de hidrogênio e ar no software ANSYS Fluent;
- b) Obter resultados do comportamento de superfície de chama característicos para reações de hidrogênio e ar confinado, por meio de uma validação qualitativa;
- c) Validar o modelo para simulações numéricas de forma quantitativa. Utilizar resultados de estudos similares disponíveis na literatura para realização de uma análise comparativa;
- d) Mensurar o impacto de diferentes razões de bloqueio (0,3; 0,5 e 0,7) na aceleração da chama;
- e) Investigar o impacto da razão de equivalência (0,8; 1,0 e 1,2) na velocidade da frente de chama;

1.4 Organização do Trabalho

No tópico 1 são relatados os aspectos introdutórios da presente pesquisa, o estado da arte e os objetivos do estudo.

No tópico 2 a fundamentação teórica referente ao presente estudo é apresentada e detalhada. A fim de se obter o máximo de informação que fundamente a base teórica para a realização do estudo, foram usadas bibliografias específicas da área.

No tópico 3 é apresentada a metodologia empregada na pesquisa, abordando os softwares utilizados e as equações empregadas para a simulação numérica. Para criação da geometria foi utilizado o software Solid Edge, e para as simulações numéricas foi feito o uso do ANSYS Fluent. A geração de gráficos e refinamento de dados foram realizados por meio do Paraview.

No tópico 4 são apresentados os resultados e discussões provenientes dos dados obtidos a partir das simulações geradas, e posteriormente comparados com resultados de demais estudos e da literatura.

Por fim, o tópico 5 apresenta as conclusões obtidas a partir de uma revisão do estado da arte, o estabelecimento de um referencial teórico e uma visão a partir disso dos resultados gerados pela simulação numérica realizada no estudo.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo serão abordados os conceitos fundamentais relacionados à propagação de chamas e às condições necessárias para produzir sua aceleração, e a possível transição da deflagração para a detonação. Inicialmente, será apresentada a teoria fundamental sobre a propagação de chamas, diferenciando os regimes de deflagração e detonação, bem como os parâmetros que influenciam sua evolução. Em seguida, discute-se a cinética química da combustão do hidrogênio pré-misturado com o ar, considerando os principais mecanismos de reação química e sua influência na velocidade da chama.

Outro aspecto fundamental tratado é o fenômeno da transição de deflagração para detonação, DDT, o qual ocorre sob determinadas condições e pode ser influenciado pela geometria do meio confinado e pela presença de obstáculos no duto. Para descrever matematicamente esses fenômenos, são apresentadas as equações de conservação aplicadas à propagação de chamas, fornecendo a base teórica necessária para a modelagem numérica do problema investigado.

A influência da turbulência na propagação das chamas também é explorada, uma vez que a interação entre turbulência e reações químicas pode acelerar a propagação da chama e afetar as condições para a transição de deflagração para detonação, se tornando um fator de suma importância para as análises. Por fim, é discutida a abordagem numérica para a simulação de grandes escalas (LES). E, a partir dessa fundamentação teórica, serão estabelecidos os lastros necessários para a compreensão e análise dos resultados obtidos nas simulações numéricas.

2.1 Fundamentos da propagação de chamas

Os primeiros estudos sobre a propagação da frente de chama concentraram-se nos fenômenos de detonação. Uma onda de detonação é caracterizada como uma onda de combustão supersônica na qual as variáveis termodinâmicas, como pressão e temperatura, aumentam de forma abrupta. Diferentemente de uma deflagração, que depende da difusão de calor para se propagar, a detonação ocorre devido à compressão adiabática dos reagentes à frente da onda, levando à ignição da mistura. Essa onda se sustenta graças à expansão dos produtos da combustão, que fornecem a energia necessária para manter a propagação da onda de choque [Lee, 2008].

Os primeiros estudos sobre a velocidade da frente de chama foram conduzidos por Gui e Michelson, que desenvolveram os conceitos teóricos para a medição da velocidade da chama laminar. Posteriormente, Michelson foi pioneiro na medição da velocidade de chamas em uma mistura de hidrogênio e ar [Gelfand et al., 2012]. Essas descobertas foram fundamentais para o avanço das pesquisas sobre esses fenômenos

Uma frente de chama é caracterizada como uma região de reação química intensa que separa os reagentes não queimados dos produtos da combustão. Esse processo resulta na liberação de calor e na conversão de energia química em energia térmica e cinética [Turns, 2013]. Essa distinção pode ser observada na Figura 2.1.



Figura 2.1 – Imagem ilustrativa da região de reação química que divide os produtos queimados dos reagentes não queimados.

A estrutura da chama pode ser analisada em diferentes níveis de detalhamento. No primeiro nível, correspondente ao modelo hidrodinâmico das relações de Rankine-Hugoniot, a chama é vista como uma interface distinta que separa dois estados fluidodinâmicos, sendo eles os gases não queimados e os produtos da combustão, ambos em equilíbrio termodinâmico. Essa separação é regida pela conservação da massa, da composição química das espécies e da energia [Law, 2006].

No nível mais aprofundado de análise, observa-se o perfil da taxa de reação, caracterizado por um crescimento acelerado devido à ativação da reação química, seguido por uma diminuição rápida conforme o reagente é completamente consumido. Esse modelo detalhado permite uma compreensão mais precisa dos mecanismos envolvidos na propagação da chama e na interação entre os processos químicos e fluidodinâmicos [Law, 2006].

Alguns fatores podem gerar alterações na velocidade da frente de chama. Dentre esses fatores alguns deles são:

1. **Composição da mistura:** A proporção entre o combustível e oxidante influencia diretamente nessa velocidade, ou seja, a razão de equivalência é um fator de relevância;

2. **Número de Lewis:** Número adimensional de Lewis (Le) reflete a relação entre difusividade térmica (α) e difusividade de massa dos reagentes (D), que pode ser descrito pela Equação 2.1 [Gelfand et al., 2012]. Valores diferentes de 1 podem levar a instabilidades e alterações na velocidade da chama;

$$Le = \frac{\alpha}{D} \quad (2.1)$$

3. **Efeitos de alongamento (Número de Karlovitz):** Maiores valores para o número de Karlovitz estão associados a maiores taxas de deformação da chama, que influenciam diretamente na velocidade da chama [Law, 2006]. O número de Karlovitz é descrito pela seguinte equação [Gelfand et al., 2012]:

$$Ka = K \frac{\delta_0}{S_u^0} \quad (2.2)$$

onde Ka representa o número de Karlovitz, K é o fator de estiramento (*stretch*), δ_0 é a espessura laminar da chama, e S_u^0 , a velocidade laminar de estiramento.

4. **Efeitos de perda de calor:** A perda de calor para as superfícies ao redor pode desacelerar ou até mesmo extinguir a chama;
5. **Pressão e temperatura inicial:** Pressões e temperaturas mais altas tendem a aumentar a velocidade de combustão, enquanto menores reduzem a reatividade da mistura;
6. **Presença de adicionais inertes:** Componentes inertes que não contribuem para a reação diluem a mistura e reduzem a velocidade da frente de chama;
7. **Inclusão de obstáculos:** A inclusão de obstáculos gera razões de bloqueio que induzem perturbações na frente de chama, criando uma superfície maior e por consequência a acelerando.

2.2 Cinética química da combustão de hidrogênio e ar

A seleção do mecanismo de cinética química adequado é um fator determinante para a precisão das simulações numéricas de combustão. A escolha do modelo adequado impacta diretamente a previsão da velocidade de chama, tempos de indução química e distribuição de produtos da reação, influenciando assim a precisão das análises computacionais.

Mecanismos completos envolvem uma elevada necessidade de computacional, quando as simulações são realizadas em duas ou três dimensões. Em tais casos, uma alternativa é a utilização de mecanismos simplificados. Gamezo et al., 2007, ressaltam o uso de um mecanismo de passo único que permite reduzir a complexidade computacional dos cálculos ao modelar a combustão de hidrogênio. No entanto, a simplificação pode comprometer a representação precisa da cinética química envolvidas, tornando-se necessário um balanço entre custo computacional e fidelidade dos resultados.

A equação de Arrhenius modificada é apresentada pela Equação 2.3:

$$k_{f,m} = A_m T^n \exp\left(-\frac{E_{a,m}}{RT}\right) \quad (2.3)$$

onde $k_{f,m}$ é o coeficiente da taxa de reação elementar direta para a espécie m , A_m representa o fator pré-exponencial, T a temperatura, n o expoente de temperatura, $E_{a,m}$ a energia de ativação, e por fim, R representa a constante universal dos gases.

Conforme destacado por Emami et al., 2015, a seleção de um mecanismo detalhado, como o de Wang et al., 2023, possibilita a obtenção de valores mais precisos para a velocidade da chama laminar e tempos de indução química ao longo de uma ampla faixa de razões de equivalência. Porém, a resolução de mecanismos detalhados impõe um alto custo computacional, devido à necessidade de integração numérica de sistemas de equações diferenciais ordinárias (EDOs) que constituem um sistema rígido. Um exemplo de mecanismo detalhado utilizado por Wang et al., 2023, é apresentado na Tabela 2.1:

Tabela 2.1 – Mecanismo de 19 passos para reação de hidrogênio-ar [Wang et al., 2023].

No.	Reação	A	n	E [kcal/mol]
1	$\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{OH}$	$3,55 \times 10^{15}$	-0,41	16,60
2	$\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H} + \text{OH}$	$5,08 \times 10^4$	2,67	6,29
3	$\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	$2,16 \times 10^8$	1,51	3,43
4	$\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	$2,97 \times 10^6$	2,02	13,40
5	$\text{H}_2 + \text{N}_2 \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{N}_2$	$5,25 \times 10^{19}$	-1,40	104,38
6	$\text{O} + \text{O} + \text{N}_2 \rightarrow \text{O}_2 + \text{N}_2$	$4,16 \times 10^{15}$	-0,50	0,00
7	$\text{O} + \text{H} + \text{N}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{N}_2$	$4,71 \times 10^{18}$	-1,00	0,00
8	$\text{H} + \text{OH} + \text{N}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{N}_2$	$4,80 \times 10^{22}$	-2,00	0,00
9	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{N}_2 \rightarrow \text{HO}_2 + \text{N}_2$	$6,37 \times 10^{20}$	-1,72	0,52
10	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}_2$	$1,66 \times 10^{13}$	0,00	0,82
11	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	$7,08 \times 10^{13}$	0,00	0,66
12	$\text{HO}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$	$3,25 \times 10^{13}$	0,00	0,00
13	$\text{HO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	$2,89 \times 10^{13}$	0,00	-0,50
14	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	$2,40 \times 10^{14}$	0,00	11,98
15	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{N}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{OH} + \text{N}_2$	$2,60 \times 10^{17}$	0,00	45,50
16	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{OH}$	$1,41 \times 10^{13}$	0,00	3,97
17	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{HO}_2$	$1,82 \times 10^{13}$	0,00	7,95
18	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{HO}_2$	$9,55 \times 10^6$	2,00	3,97
19	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	$1,00 \times 10^{12}$	0,00	0,00

As unidades estão em $\text{cm}^3\text{-mol}^{-1}\text{-s-kcal-K}$, e $k = A T^n \exp(-E/RT)$

2.3 Morfologias características da propagação de chamas

A propagação de chamas pré-misturadas de hidrogênio e ar em dutos confinados possui uma sequência de transformações morfológicas distintas em sua frente de chama, fortemente influenciadas pela interação entre a expansão térmica dos produtos de combustão e os efeitos hidrodinâmicos. Estudos experimentais e numéricos indicam que, ao longo de seu desenvolvimento, a frente de chama evolui tipicamente através de seis formatos principais. Esses formatos de superfície de frente de chama são apresentados na Figura 2.2.

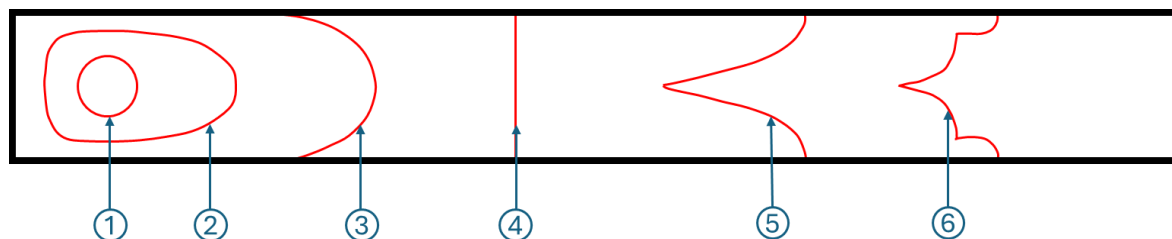


Figura 2.2 – Formatos característicos de superfície de frente de chama para chamas pré-misturadas de hidrogênio e ar em dutos confinados [Adaptado de Sheng et al., 2023].

Os formatos característicos são nomeados da seguinte forma:

1. **Chama esférica** – *Spherical Flame*;
2. **Chama em formato de dedo** – *Finger Shape Flame*;
3. **Saia de chama tocando a parede** – *Skirt Touching Wall*;
4. **Chama plana** – *Planar Flame*;
5. **Chama em forma de tulipa** – *Tulip Flame*;
6. **Chama em forma de tulipa distorcida** – *Distorted Tulip Flame*.

No estágio inicial, após a ignição, forma-se a chama esférica, não restringida pelas paredes do duto, expandindo-se de forma aproximadamente hemisférica devido à liberação de calor e consequente expansão dos gases queimados. À medida que a frente se aproxima das paredes laterais, ocorre a transição para a chama em formato de dedo, caracterizada por aceleração axial e desaceleração radial da frente, controlada predominantemente pela expansão térmica [Sheng et al., 2023].

Posteriormente são formadas a saia de chama tocando a parede e chama planar. Em decorrência da interação da frente de chama com o campo de escoamento turbulento e instabilidades hidrodinâmicas pode ocorrer a inversão da curvatura da frente, dando origem à chama tipo tulipa ou a variações como a tulipa distorcida. Este formato apresenta oscilações periódicas de velocidade e área de superfície, podendo estar associado a fenômenos de alterações marcantes na taxa de liberação de calor [Sheng et al., 2023].

2.4 O fenômeno de transição de deflagração para detonação

O processo de transição de deflagração para detonação é um fenômeno de elevada importância, tendo em vista que quando a velocidade da frente de chama ultrapassa a velocidade do som no meio, alguns comportamentos únicos podem ser observados. A DDT ocorre quando uma chama que antes estava subsônica (caracterizando uma deflagração) acelera a ponto de atingir velocidades supersônicas e assim se tornando uma onda de detonação autossustentada. O conhecimento e observação de uma DDT se faz relevante pois pode afetar a estrutura de projetos caso seja alcançada de forma não prevista, ocasionando riscos à segurança.

Um conceito fundamental no estudo das detonações é a velocidade de Chapman-Jouguet (CJ), que define o limite mínimo da velocidade na qual uma detonação pode se propagar de forma estável sem a necessidade de um aporte energético externo. As ondas de detonação provenientes da detonação CJ são bem definidas no contexto das relações Rankine-Hugoniot, sendo baseadas na conservação da massa, momento e energia [Lee, 2008]. A solução dessas equações fornece a velocidade mínima de detonação para um determinado sistema reativo, sendo um parâmetro crucial para a análise numérica do comportamento da combustão em dutos fechados. Em dutos com obstáculos, as interações entre as ondas de choque refletidas e as frentes de chama influenciam significativamente o processo de DDT, podendo levar a uma aceleração da chama até atingir a condição CJ.

A teoria de Chapman-Jouguet estabelece que uma onda de detonação é caracterizada por um equilíbrio dinâmico entre a compressão na frente de onda e a subsequente expansão dos produtos. Esse equilíbrio ocorre pelo fato de as detonações serem ondas compressivas, nas quais uma onda de choque causa a compressão da mistura não queimada antes da chegada da onda de reação. Devido à conservação da massa e energia, as ondas de detonação são seguidas por ondas de rarefação. As detonações em que a velocidade da frente da onda é superior à velocidade CJ são conhecidas como *overdriven detonations*, e apresentam uma estrutura instável que depende de uma fonte externa de energia para ser sustentada. No entanto, à medida que a energia extra se dissipa, a onda de detonação tende a se ajustar até alcançar a velocidade CJ, um estado no qual a onda se torna autossustentada.

A estabilidade da detonação CJ pode ser explicada pela condição sônica na frente da onda. O escoamento imediatamente a jusante da detonação move-se na velocidade do som nos produtos, formando uma barreira que impede a penetração de ondas de rarefação que poderiam

enfraquecer a estrutura da onda de detonação. Dessa forma, a detonação CJ permanece estável e contínua sem dissipação significativa de energia [Lee, 2008].

Esse processo gera algumas mudanças no regime de combustão, sendo algumas delas as seguintes:

- **Formação de uma onda de choque acoplada à reação química:** A onda de choque criada pela DDT é formada a frente da chama e comprime a mistura dos reagentes [Lee, 2008]. Existe uma estrutura tridimensional instável, onde ondas de choque transversais se cruzam com regiões reativas. Esse processo é sustentado pela liberação coerente e sincronizada de energia química das explosões locais [Karanam et al., 2018].
- **Aceleração abrupta da chama e uma maior turbulência:** Durante a fase de transição, a velocidade da chama pode atingir um regime supersônico em relação aos gases não queimados, embora ainda seja subsônica em relação aos reagentes pré-comprimidos [Karanam et al., 2018]. Essa aceleração também ocorre por conta das diversas instabilidades hidrodinâmicas que são criadas e suas interações acústicas [Lee, 2008];
- **Geração de pontos quentes (*hot spots*):** O impacto de ondas de choque refletidas pode gerar regiões de alta temperatura que podem atuar como pontos de ignição localizados com reações químicas espontâneas [Lee, 2008]. Esses *hot spots* podem acelerar ainda mais o processo de combustão, acelerando a velocidade da frente de chama [Emami et al., 2015];
- **Flutuação da pressão:** A DDT é frequentemente acompanhada por variações bruscas na pressão, devido à interação entre as ondas de choque e a frente de chama, resultando em instabilidades como a de Richtmyer-Meshkov (R-M) [Wang et al., 2022];
- ***Overdriven Detonation*:** A detonação inicial pode exceder a velocidade de Chapman-Jouguet (CJ), devido à rápida liberação de energia nos pontos de ignição [Lee, 2008];
- **Relaxamento para Detonação CJ:** Posteriormente a *overdriven detonation*, a detonação decai para uma detonação estável no regime de Chapman-Jouguet [Lee, 2008].

2.5 Instabilidades hidrodinâmicas em escoamentos reativos confinados

A propagação de frentes de chama em meios confinados é um fenômeno instável. Interações entre gradientes de pressão, massa específica e velocidade no escoamento podem

amplificar pequenas perturbações iniciais, modificando a morfologia da frente de combustão e influenciando diretamente a velocidade de propagação, a taxa de liberação de calor e o regime de combustão. Essas instabilidades hidrodinâmicas em aplicações envolvendo combustão de hidrogênio e ar em dutos constituem um dos mecanismos-chave que pode levar à DDT [Zhou, 2017; Brouillette, 2002].

Diversos tipos de instabilidades podem se manifestar em escoamentos reativos, com destaque para aquelas de origem puramente hidrodinâmica, como as instabilidades de Rayleigh–Taylor (RT) e de Richtmyer–Meshkov (RM), e para instabilidades específicas de frentes de chama, como a de Landau–Darrieus (LD). Em configurações confinadas e com obstáculos, a ocorrência simultânea de diferentes instabilidades potencializa a rugosidade da frente, a geração de vorticidade e a formação de zonas de mistura turbulenta [Zhou, 2017].

A caracterização e compreensão desses mecanismos são essenciais não apenas para a previsão do comportamento da frente de chama, mas também para a modelagem numérica e o controle de riscos associados a explosões em meios confinados, por isso são fatores cruciais para análise.

2.5.1 Instabilidade Rayleigh–Taylor

Uma das instabilidades mais relevantes nesse contexto é a instabilidade de Rayleigh–Taylor (RT), que ocorre quando um fluido com determinada massa específica acelera outro de massa específica diferente. Pelo fato de os produtos estarem em temperaturas mais elevadas que os reagentes, sua massa específica se torna menor e acelera os reagentes (não queimados), que possuem maior massa específica. Assim o gradiente de pressão é oposto ao gradiente de massa específica. Essa condição hidrodinâmica instável promove o crescimento de pequenas perturbações presentes na interface, mesmo que sua origem seja associada apenas a rugosidades microscópicas ou flutuações aleatórias do escoamento [Zhou, 2017]. O comportamento descrito pode ser observado na Figura 3.3.

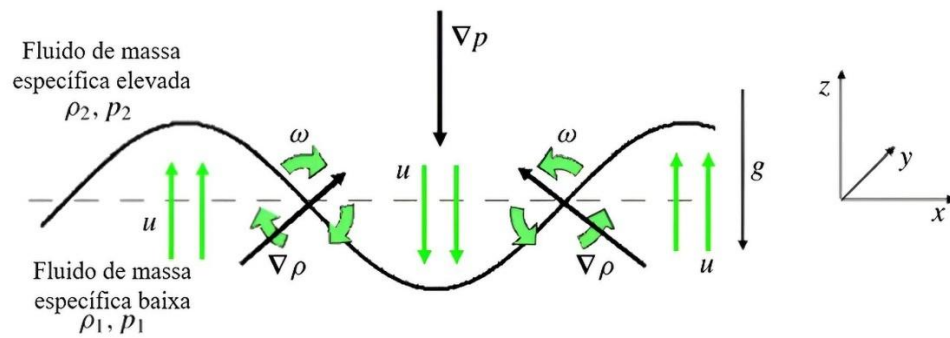


Figura 2.3 – Imagem ilustrativa da configuração da instabilidade RT, na qual o torque baroclínico na interface cria vorticidade e induz um campo de velocidade que a aumenta [Adaptado de Zhou, 2017].

À medida que a amplitude das perturbações se torna comparável ao seu comprimento de onda, a instabilidade de RT entra no regime não linear. Nessa etapa, a interface evolui de forma assimétrica, com o desenvolvimento de “espinhos” (*spikes*), onde há penetração do fluido de maior massa específica no de menor massa específica. Além desse desenvolvimento há uma formação de “bolhas” (*bubbles*), onde há ascensão do fluido de maior massa específica no de menor massa específica. As bordas dessas estruturas estão sujeitas à instabilidade de Kelvin–Helmholtz, que provoca o enrolamento (*wrinkling*) e a formação de estruturas em escalas menores, favorecendo o início da mistura turbulenta [Zhou, 2017].

A identificação da instabilidade de RT em resultados numéricos ou experimentais envolve a observação de estruturas características de “espinhos” e “bolhas” alinhadas com a direção da aceleração, o aumento progressivo da espessura da camada de mistura e o surgimento de padrões em “cogumelo” (*mushrooming*) decorrentes da ação outras instabilidades como a de Kelvin–Helmholtz [Zhou, 2017]. As estruturas de “espinhos” e “bolhas” podem ser observadas na Figura 2.4.

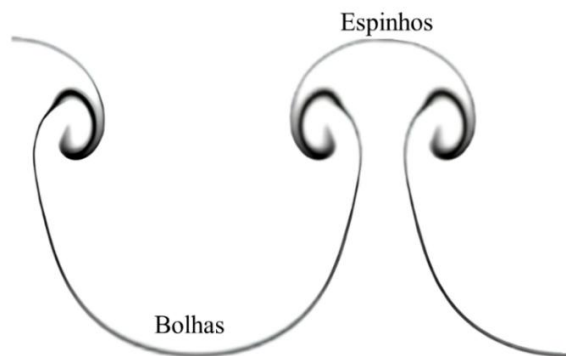


Figura 2.4 – Imagem ilustrativa das estruturas características de “espinhos” e “bolhas”
[Adaptado de Zhou, 2017].

A incidência das instabilidades de RT é menos comum em detonações que nas deflagrações por conta da magnitude dos valores de pressão, porém ainda assim, podem ocorrer em detonações desaceleradas (*quasi-detonation*), quando há inversão do gradiente de massa específica em zonas de expansão ou reflexão de choques [Zhou, 2017].

Para casos em que se tem dutos com obstáculos, à medida que a chama passa por eles, essa instabilidade provoca o enrugamento da frente de chama, aumentando sua área superficial e, conseqüentemente, a taxa de reação química. Esse efeito é amplificado pelo aumento da aceleração do fluxo à frente da chama, que pode atingir velocidades supersônicas em tempos menores [Sheng et al., 2023].

A importância da instabilidade RT foi ressaltada por Shen et al., 2019, que em seus estudos concluíram que essa instabilidade somada à interação chama-onda de pressão, foram fatores determinantes para o surgimento da morfologia chama em forma de tulipa e o fenômeno da inversão de chama.

2.5.2 Instabilidade Richtmyer–Meshkov

Na propagação de chamas tem-se a formação de ondas de choque, geradas devido à rápida expansão dos produtos da combustão e começam a interagir com os obstáculos e as paredes do duto. A reflexão dessas ondas no ambiente confinado gera instabilidades adicionais, em particular a instabilidade de Richtmyer–Meshkov (RM), que ocorre quando uma onda de choque atravessa uma interface entre fluidos de diferentes massas específicas. Essa interação provoca a deformação da frente de chama, contribuindo ainda mais para o aumento da área de

reação e para o fortalecimento da combustão [Gamezo et al. 2007]. O mecanismo fundamental de amplificação está associado à geração de vorticidade baroclínica, decorrente do desalinhamento entre o gradiente de pressão imposto pela onda de choque e o gradiente da massa específica através da interface.

Após a refração da onda de choque incidente, um choque distorcido (*distorted shock*) é transmitido ao segundo fluido, enquanto um choque ou onda de rarefação é refletido para o primeiro. A interface é acelerada impulsivamente, passando a se deslocar com velocidade constante na direção do choque transmitido. Duas interpretações equivalentes podem ser usadas para descrever a evolução subsequente, a geração de vorticidade baroclínica, que induz rotação e deformação da interface, e a ação de perturbações de pressão locais próximas a cristas e vales, que intensificam a penetração do fluido de maior massa específica no de menor [Brouillette, 2002].

A RM aumenta a taxa de liberação de calor e favorecer a transição de regimes de queima, incluindo a DDT, devido à amplificação da área de chama e ao incremento da turbulência na zona de reação [Bambauer et al., 2023; Khodadadi Azadboni et al., 2017]. Além desses fatores, essa instabilidade foi definida como o mecanismo dominante no quesito de sustentação da aceleração até uma detonação por Emami et al., 2025.

A Figura 2.5 ilustra o mecanismo da instabilidade RM, que ocorre quando uma frente de chama é atravessada por uma onda de choque. Essa instabilidade surge a partir do desalinhamento entre o gradiente de massa específica $\nabla\rho$, presente na interface entre os gases não queimados (reagentes) e queimados (produtos), e o gradiente de pressão ∇p imposto pela passagem do choque. Esse desalinhamento gera o torque baroclínico, responsável por induzir a vorticidade local e promover o enrugamento da frente de chama.

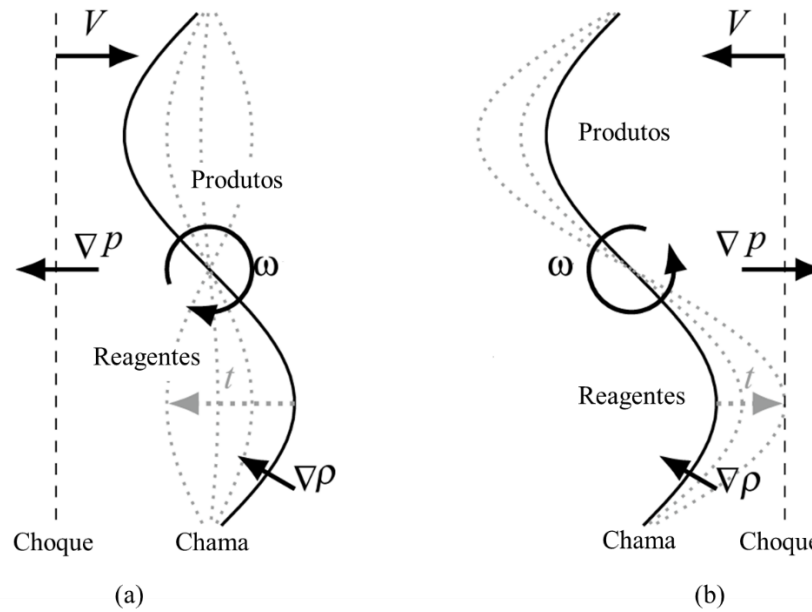


Figura 2.5 – Imagem ilustrativa da formação de vórtices baroclínicos [Adaptado de Bambauer et al., 2023].

Na Figura 2.5, pode-se observar dois cenários distintos, em (a), o choque propaga-se do meio não queimado para o queimado, ocasionando o chamado “efeito de reversão de fase”, em que a direção de rotação do vórtice é invertida. Já em (b), o choque desloca-se do meio queimado para o não queimado, amplificando a perturbação inicial da interface. Em ambos os casos, a consequência direta é a deformação progressiva da superfície de chama, marcada pela formação de ondulações que ampliam sua área superficial e podem aumentar a taxa global de reação. Este fenômeno é de especial relevância no cenário da presente pesquisa pois o aumento da superfície da chama contribui para aceleração da frente de combustão e potencial transição de deflagração para detonação, configurando a RM como um mecanismo crucial na evolução de instabilidades hidrodinâmicas em meios reativos.

Já a Figura 2.6 ilustra o mecanismo de deposição de vorticidade em uma interface entre dois fluidos de diferentes massas específicas em dutos confinados quando submetida à passagem de uma onda de choque, localizada a jusante do escoamento reativo com os produtos da reação.

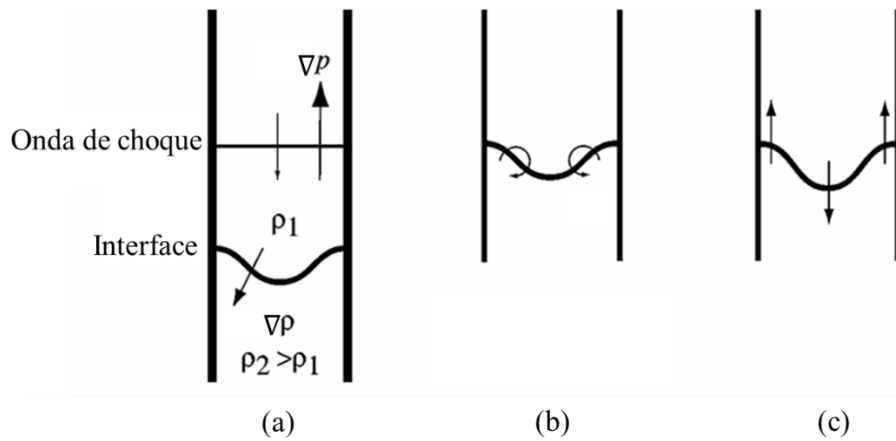


Figura 2.6 – Imagem ilustrativa da instabilidade RM em dutos [Adaptado de Brouillette et al., 2002].

Em (a), observa-se a configuração inicial, com a frente de choque incidindo sobre a interface que separa o fluido leve (ρ_1) do fluido pesado ($\rho_2 > \rho_1$). O desalinhamento entre os gradientes de pressão (∇p) e massa específica ($\nabla \rho$) na vizinhança da interface gera as condições necessárias para o surgimento do torque baroclínico. Em (b), esse mecanismo se manifesta pela deposição de circulação. Por fim, em (c), evidencia-se a evolução subsequente da interface já deformada, em que as perturbações iniciais são amplificadas pela ação dos vórtices induzidos, conduzindo ao desenvolvimento de estruturas características da instabilidade de Richtmyer–Meshkov. Dessa forma faz-se visual a influência da instabilidade RM na morfologia da frente de chama.

2.5.3 Instabilidade Kelvin–Helmholtz

Outra instabilidade hidrodinâmica importante nesse cenário é a instabilidade de Kelvin–Helmholtz (KH), que se desenvolve devido à presença de gradientes de velocidade entre camadas de fluido em movimento [Lee, 2008]. Essa condição leva à amplificação de perturbações interfaciais, podendo gerar estruturas em forma de rolos (*rollup*) e, eventualmente, promover a transição para mistura turbulenta [Zhou, 2017].

Durante o desenvolvimento das instabilidades RT ou RM, o escoamento ao longo das laterais dos “espinhos” e “bolhas” gera zonas de cisalhamento. Nessas regiões, pequenas ondulações crescem, enrolando-se em estruturas espiraladas que aumentam significativamente a área de interface e favorecem a cascata para escalas menores [Zhou, 2017]. Esse processo

intensifica a troca de massa e energia entre os fluidos, acelerando o estabelecimento de um regime de mistura turbulenta, e caracterizando a instabilidade KH.

Essa instabilidade se manifesta de maneira significativa quando um jato de material queimado atravessa uma região estreita do canal, gerando uma camada de cisalhamento a jusante do obstáculo. Como resultado, forma-se uma estrutura de vórtices na superfície da chama, promovendo um maior desenvolvimento da turbulência e intensificando as interações entre os gases queimados e não queimados.

A manifestação dessa instabilidade está representada na Figura 2.7, que apresenta a configuração clássica da instabilidade KH, caracterizada pela presença de uma interface entre dois fluidos de massas específicas distintas, sujeitos a velocidades de escoamento em sentidos opostos. Esse arranjo cria um forte gradiente de velocidade na região de contato, onde pequenas perturbações na interface podem ser amplificadas em razão do cisalhamento.

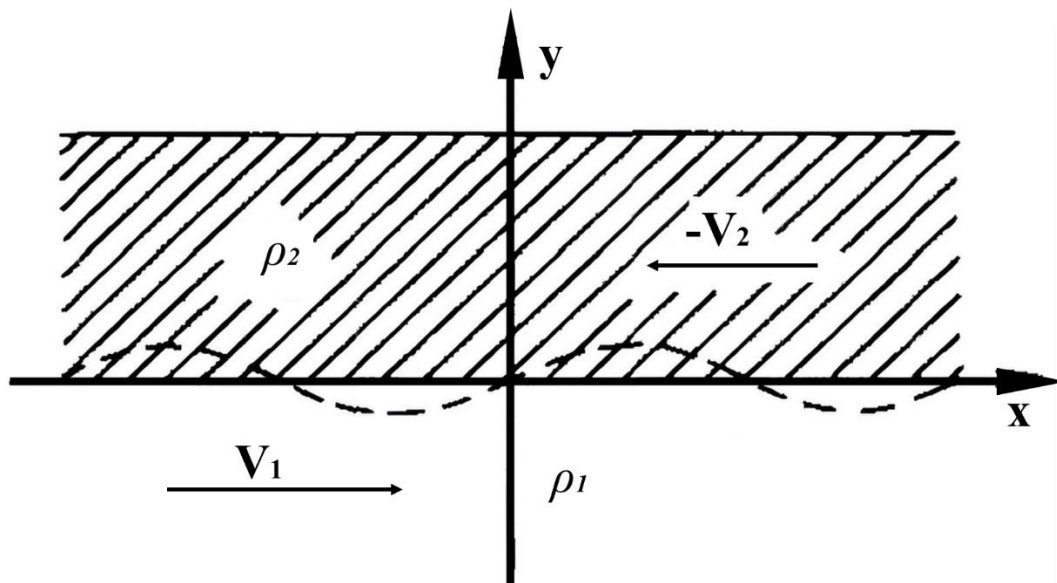


Figura 2.7 – Imagem ilustrativa da instabilidade KH [Adaptado de Zhou, 2017].

O mecanismo de instabilidade decorre da energia cinética do escoamento que induz perturbações, gerando vórtices que se desenvolvem progressivamente ao longo da interface. Zhou, 2017, mostra que o crescimento inicial dessas perturbações pode ser descrito pela teoria linear da KH, em que depende da diferença de velocidades e do contraste de diferentes massas específicas entre os fluidos, como pode ser observado na figura apresentada.

2.5.4 Instabilidade Landau–Darrieus

A instabilidade de Landau–Darrieus (LD) é um fenômeno característico de frentes de chama laminares propagando-se em meios pré-misturados, e está associada à expansão térmica dos gases ao atravessar a frente de reação [Bell et al., 2004]. Essa expansão provoca um desbalanceamento hidrodinâmico que torna a frente de chama plana instável, levando à formação de ondulações e ao consequente aumento da área superficial da frente.

A evolução da instabilidade segue três estágios principais. O primeiro é caracterizado por uma fase linear, com crescimento exponencial de ondulações na frente. Já o segundo possui uma fase não linear inicial, na qual as ondulações formam “cúspides” (*cusps*) que estabilizam parcialmente o crescimento, e, por fim, a fase não linear tardia, marcada pela possível fusão de cúspides e pela formação de estruturas celulares estáveis [Bell et al., 2004]. Em condições de baixa massa específica ou elevada sensibilidade termo-difusiva, pode ocorrer quebra da estabilização não linear, levando a um aumento mais acentuado da velocidade aparente da chama.

Em chamas confinadas, a LD atua em conjunto com outros mecanismos, como instabilidades termo-difusivas, de Kelvin–Helmholtz e de Rayleigh–Taylor, podendo amplificar o enrugamento da frente e favorecer transições de regime de combustão [Bell et al., 2004]. Em meios confinados, a interação da LD com recirculações e gradientes de velocidade induzidos por obstáculos potencializa o desenvolvimento de estruturas celulares e altera significativamente a dinâmica global da chama.

A identificação da LD em resultados numéricos ou experimentais é feita observando-se o crescimento inicial de ondulações na frente em condições de ausência de forças externas significativas, seguido pela formação de cúspides [Bell et al., 2004]. A representação da formação da instabilidade LD pode ser observada da Figura 2.8.

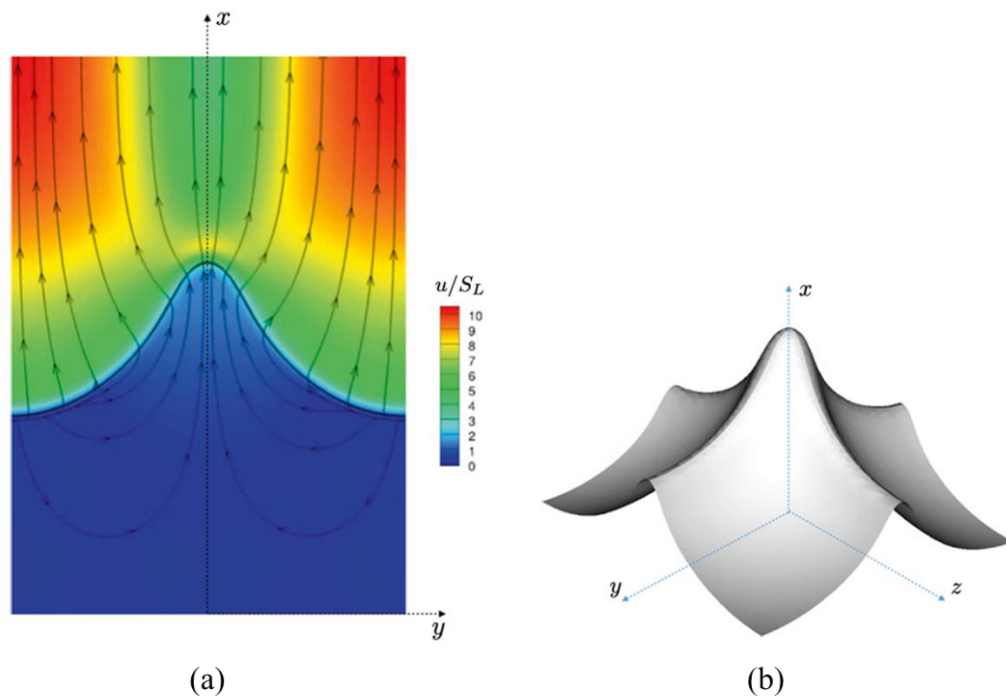


Figura 2.8 – Imagem ilustrativa da instabilidade LD, onde em (a) tem-se uma visualização bidimensional e em (b) tridimensional [Adaptado de Matalon, 2018].

Em (a), observa-se em um campo bidimensional que a chama, inicialmente perturbada, evolui para uma configuração de cúspides com uma intrusão pronunciada em direção aos gases queimados, acompanhada por linhas de corrente que evidenciam o desvio do escoamento e a geração de vorticidade na região a jusante. Essa morfologia resulta em uma superfície de chama mais extensa e, conseqüentemente, em uma velocidade de propagação superior à velocidade laminar. Já em (b), observa-se um campo tridimensional, nota-se a generalização da estrutura de cúspide para uma forma espacial complexa, na qual cristas alongadas se estendem em direção ao gás queimado, mantendo a mesma característica de aumento da área superficial e da taxa de consumo da mistura.

2.5.5 Instabilidade celulares e acústicas

Além das instabilidades hidrodinâmicas clássicas já abordadas, frentes de chama podem estar sujeitas a outros mecanismos que afetam sua morfologia e velocidade de propagação. Entre eles, destacam-se as instabilidades celulares, geralmente associadas a efeitos termo-

difusivos e hidrodinâmicos combinados, e as instabilidades acústicas, que envolvem o acoplamento entre flutuações de pressão e a liberação de calor na reação.

As instabilidades celulares manifestam-se na forma de um padrão de pequenas células repetitivas na frente de chama, resultantes da interação entre expansão térmica, difusão de massa e calor, e curvatura local da frente de chama [Bell et al., 2004; Böttler et al., 2023]. Em chamas termo-difusivamente instáveis, ondulações iniciais amplificam-se e formam cúspides que se estabilizam parcialmente, mas podem evoluir para arranjos celulares persistentes. Esses padrões alteram significativamente a área superficial da chama, e por consequência, a velocidade global de propagação também é alterada. A escala e a organização dessas células dependem de parâmetros como número de Lewis, número de Markstein e condições de confinamento, e podem ser modificadas pela interação com escoamentos turbulentos ou por perturbações externas [Bell et al., 2004].

Já as instabilidades acústicas surgem de um mecanismo de realimentação positivo entre oscilações de pressão no meio e variações na taxa de liberação de calor da reação [Zhou, 2017]. Em sistemas confinados, ondas de pressão podem refletir nas paredes e interagir com a frente de chama, modulando localmente sua velocidade e posição. Quando a fase dessas oscilações de pressão coincide com a da liberação de calor, ocorre amplificação mútua, levando a variações de grande amplitude no campo de pressão, sendo um fenômeno característico de instabilidades termo-acústicas.

Em ambientes confinados com obstáculos, as instabilidades celulares e acústicas podem atuar de forma acoplada. O padrão celular amplifica a sensibilidade da frente às flutuações de pressão, enquanto o campo acústico realimenta e reorganiza as estruturas celulares.

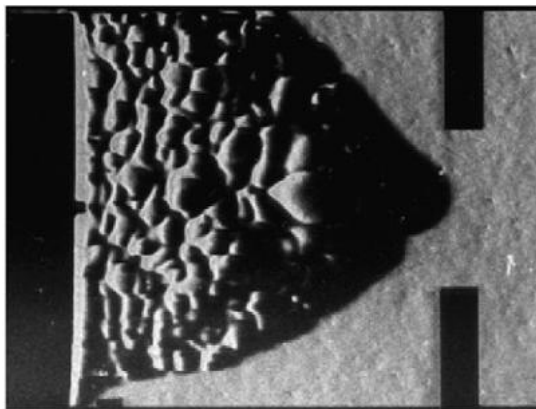


Figura 2.9 – Imagem experimental da instabilidade celular capturada por Ciccarelli e Dorofeev, 2008.

2.5.6 Considerações sobre o efeito de obstáculos nas instabilidades

A presença de obstáculos em dutos confinados altera significativamente a dinâmica das frentes de chama e das instabilidades associadas. A interação da chama com obstáculos provoca geração de ondas de choque e ondas de pressão refletidas, zonas de recirculação e intensos gradientes de velocidade e pressão. Essas condições modificam o campo de escoamento e podem amplificar ou atenuar mecanismos instáveis já presentes [Bambauer et al., 2023].

Ondas de choque refletidas a partir dos obstáculos interagem com a frente de chama, promovendo a instabilidade RM, que aumenta o enrugamento e a área superficial reativa, favorecendo o crescimento da taxa de reação e a aceleração da chama. Além disso, a desaceleração e a mudança abrupta na direção do escoamento em torno dos obstáculos geram regiões de cisalhamento propícias ao desenvolvimento da instabilidade de KH, que ao interagir com a RM, contribui para a formação de estruturas de vórtices e para a transição para mistura turbulenta.

A modificação do campo de aceleração local devido a geometrias complexas pode também criar condições favoráveis à instabilidade de RT, especialmente quando o escoamento ou a frente de chama sofre desaceleração contrária ao gradiente da massa específica. Em paralelo, o confinamento e a periodicidade dos obstáculos favorecem o estabelecimento de instabilidades acústicas, pois as ondas de pressão refletem e interagem repetidamente com a frente de chama, modulando seu formato e velocidade [Bambauer et al., 2023].

A presença simultânea dessas instabilidades juntamente com a interação da chama com os vórtices gerados pelos obstáculos, resulta no aumento expressivo da área da superfície da chama, o que potencializa a taxa de liberação de energia no meio reativo. Desta forma, esse fenômeno contribui para o fortalecimento das ondas de choque, tornando o escoamento mais propenso à transição da deflagração para detonação [Gamezo et al., 2007]. A Figura 2.10 apresenta resultados experimentais e numéricos gerados por Jiang et al., 2024, nos quais se faz perceptível a influência dos obstáculos na morfologia da frente de chama. Por esse motivo, a análise dessas instabilidades hidrodinâmicas é fundamental para a compreensão da propagação da chama em dutos confinados, especialmente em geometrias que incluem obstáculos. A modelagem e a simulação numérica desses efeitos são essenciais para prever a evolução da combustão e sua interação com ondas de choque, permitindo um melhor entendimento dos

mecanismos que governam a DDT e possibilitando o desenvolvimento de estratégias para seu controle em sistemas propulsivos e de segurança.

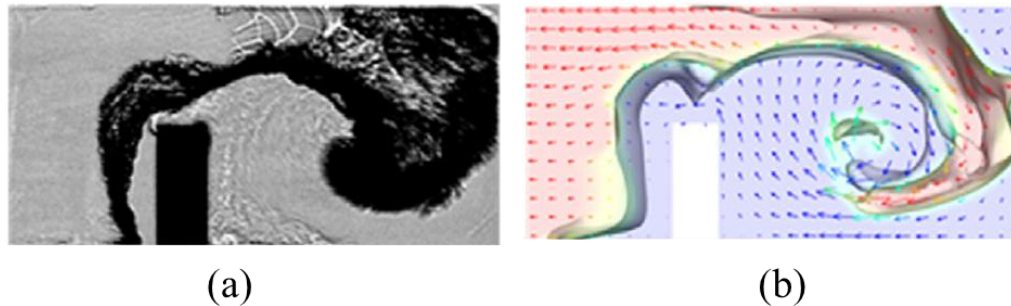


Figura 2.10 – Representações da atuação da influência de obstáculos em instabilidades para dados experimentais (a) e numéricos (b) gerados por Jiang et al., 2024.

Em escoamentos reativos sem obstáculos a instabilidade RT é uma das responsáveis pela formação de “espinhos” e “bolhas”, esse comportamento é enfatizado na Figura 2.11. Porém, a presença de obstáculos altera significativamente a morfologia da frente de chama. Ainda se faz possível a identificação de estruturas similares aos “espinhos” e “bolhas” quando se tem obstáculos, porém de forma distorcida e unilateral. Esses fatores enfatizam como obstáculos alteram significativamente a morfologia da frente de chama, que por consequência, alteram a taxa de reação influenciando na velocidade da chama.

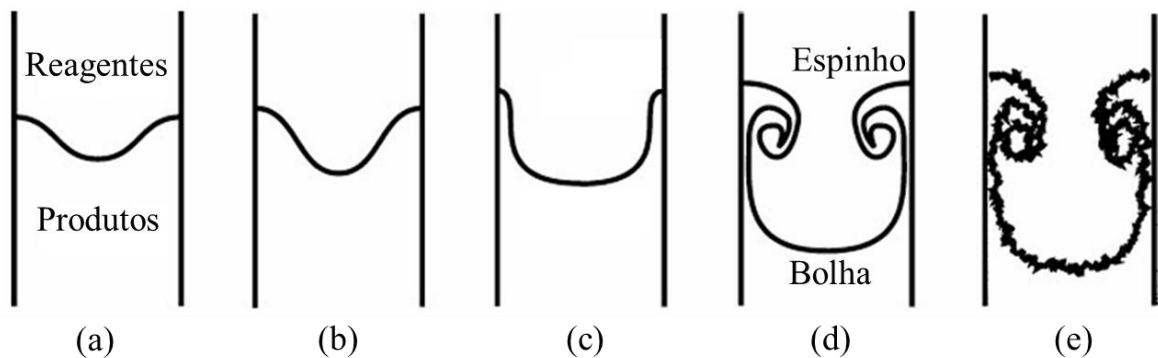


Figura 2.11 – Imagem ilustrativa da formação de “espinhos” e “bolhas” em dutos [Adaptado de Brouillette et al., 2002].

2.6 Equações de conservação aplicadas à propagação de chamas

A modelagem matemática da propagação de chamas em meios turbulentos baseia-se nas equações de conservação, que descrevem o comportamento das variáveis fundamentais do escoamento, como massa, momento, energia e transporte de espécies químicas. Essas equações são essenciais para descrever a combustão e os processos associados ao transporte de calor e espécies químicas na mistura reagente.

No contexto das simulações numéricas da combustão turbulenta, o modelo LES permite a separação das escalas de movimento por meio de uma função de filtragem, na qual as variáveis filtradas são indicadas por um traço superior (-) e as variáveis filtradas de Favre, que levam em consideração a massa específica, são denotadas pelo seguinte símbolo ($\tilde{}$) [Mei et al., 2022]. A seguir, são apresentadas as equações governantes utilizadas na modelagem da propagação da chama turbulenta.

A conservação da massa para um fluido compressível, filtrada pelo método LES, é expressa por [Mei et al., 2022]:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.4)$$

onde ρ representa a massa específica, t representa o tempo, e por fim, \tilde{u}_i representa as componentes da velocidade média filtrada no espaço x_i .

Já a conservação do momento é descrita pela equação de Navier-Stokes filtrada [Mei et al., 2022]:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \bar{p} \delta_{ij} - \tilde{\tau}_{ij} + \tau_{ij}^{sgs}) \bar{\rho}}{\partial x_j} = 0 \quad (2.5)$$

onde p representa a pressão do fluido, δ_{ij} é o delta de Kronecker, $\tilde{\tau}_{ij}$, o tensor de tensões viscosas médias, e por fim, τ_{ij}^{sgs} representa o tensor submalha, que modela os efeitos das escalas menores não resolvidas pelo LES.

A conservação da energia total na simulação LES é expressa por [Mei et al., 2022]:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial [(\bar{\rho} \tilde{E} + \bar{P}) \tilde{u}_i + \bar{q}_i - \tilde{u}_i \tilde{\tau}_{ij} + H_i^{sgs} + \delta_{ij}^{sgs}]}{\partial x_i} = 0 \quad (2.6)$$

onde \tilde{E} representa a energia total específica média filtrada, q_i é o fluxo de calor, H_i^{sgs} e δ_{ij}^{sgs} são os termos que representam a submalha (*Subgrid Scale* – SGS).

Por fim, a equação de transporte de espécies químicas é descrita por [Mei et al., 2022]:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_m}{\partial t} + \frac{\partial [\bar{\rho} \tilde{Y}_m (\tilde{u}_i + \tilde{V}_{i,m}) + Y_{i,m}^{sgs} + \theta_{i,m}^{sgs}]}{\partial x_i} = \omega_m \quad (2.7)$$

onde Y_m representa a fração de massa da espécie m , $\tilde{V}_{i,m}$ é a velocidade de difusão da espécie, ω_m é o termo de reação química, que representa a taxa de produção ou consumo da espécie devido às reações químicas.

2.7 Propagação de chamas turbulentas

A propagação da chama em meios turbulentos apresenta características significativamente distintas em relação à combustão laminar. Enquanto a velocidade de propagação de uma chama laminar é determinada essencialmente pelas propriedades termodinâmicas e químicas do combustível e do oxidante, no caso da combustão turbulenta, a velocidade da frente de chama é fortemente influenciada pelas características do campo turbulento [Gelfand et al., 2012]. Dessa forma, a quantificação da turbulência no meio reativo torna-se fundamental para a previsão e análise da velocidade da chama turbulenta e do seu comportamento dinâmico.

A interação entre a frente de chama e os redemoinhos turbulentos do escoamento é o fator chave que governa a propagação da combustão turbulenta [Law, 2006]. Essa interação é apresentada na Figura 2.12. Dependendo da intensidade e das escalas características da turbulência, diferentes regimes podem ser observados. Em condições de turbulência fraca, a chama mantém uma estrutura enrugada, onde o enrugamento é promovido pelas flutuações turbulentas, mas sem causar distorções significativas na sua integridade estrutural. Porém, à

medida que a intensidade da turbulência aumenta, a estrutura da chama pode se tornar altamente distorcida, podendo até mesmo sofrer uma transição para um regime de reação distribuída, onde não há mais uma frente de chama bem definida e a combustão ocorre de forma volumétrica dentro do meio reativo [Law, 2006].

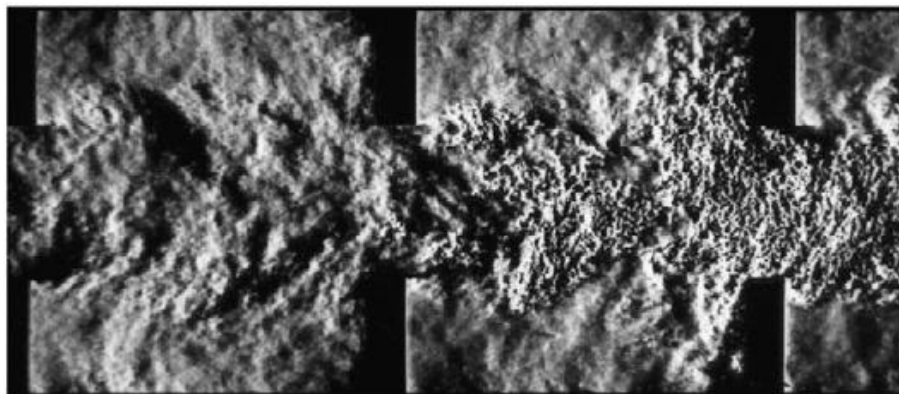


Figura 2.12 – Interação entre frente de chama e redemoinhos turbulentos [Ciccarelli e Dorofeev, 2008].

Na região onde a intensidade da turbulência é moderada, quando a velocidade característica das flutuações turbulentas não excede significativamente a velocidade de propagação da chama laminar, a chama turbulenta mantém uma frente curva e sua espessura continua semelhante à da chama laminar [Gelfand et al., 2012]. Entretanto, com o aumento da intensidade das flutuações turbulentas, o nível de curvatura da frente de chama aumenta, e a chama pode perder sua continuidade, tornando-se mais irregular e sujeita a fenômenos como extinção local e reignição. Esse comportamento evidencia o papel crítico da turbulência na propagação da chama, pois os vórtices atuam tanto no aumento da área de superfície da frente de chama, favorecendo tanto a aceleração da combustão, quanto a perturbação da estrutura da chama, que pode levar a instabilidades e à transição para regimes mais complexos de combustão.

A propagação de chamas turbulentas é amplamente influenciada pela interação entre a chama e as escalas características da turbulência, o que determina diferentes regimes de combustão turbulenta. A classificação desses regimes pode ser feita com base na razão entre as escalas da turbulência e as escalas da chama laminar, resultando em distintos comportamentos da frente de chama.

Para avaliar a influência da turbulência na estrutura da chama, é comum utilizar o número de Karlovitz (Ka_L), que compara a escala de tempo característica da chama com a escala de tempo da menor estrutura turbulenta, os redemoinhos de Kolmogorov. O número de Karlovitz pode ser expresso como [Law, 2006]:

$$Ka_L = \frac{\tau_L}{\tau_K} = \left(\frac{l_L}{l_K}\right)^2 = \left(\frac{u'_K}{S_L}\right)^2 \quad (2.8)$$

onde τ_L é o tempo característico da chama laminar, τ_K representa o tempo característico do redemoinho de Kolmogorov, l_L é a espessura da chama laminar, l_K é a escala de comprimento, u'_K representa a velocidade de flutuações turbulenta na escala de Kolmogorov, e por fim, S_L representa a velocidade de propagação da chama laminar.

A partir do número de Karlovitz faz-se possível definir regimes de combustão turbulenta. Esses regimes são frequentemente representados no diagrama de Borghi, que correlaciona a razão entre velocidade de flutuação turbulenta e a velocidade da chama laminar com a razão entre a escala integral da turbulência e a espessura da chama:

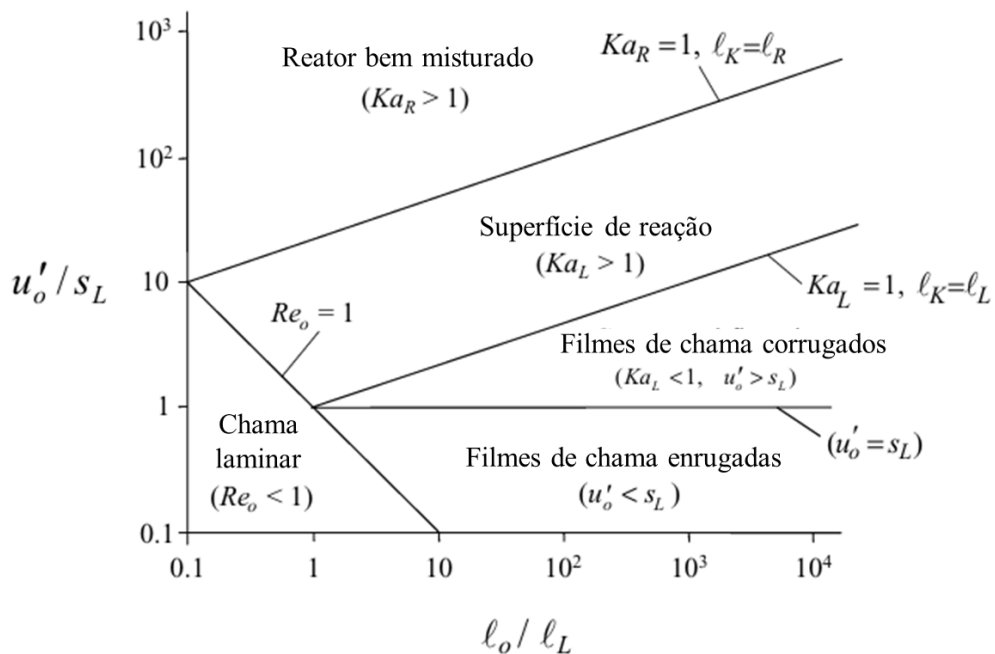


Figura 2.13 – Diagrama de regimes para combustão turbulenta pré-misturada [Law, 2006]

Os regimes de combustão turbulenta presentes no diagrama são:

- **Chama laminar (*Laminar Flames*):** A chama se propaga sem influência significativa da turbulência, tornando um regime laminar. A turbulência presente não é suficiente para enrugar a frente de chama;
- **Filmes de chama enrugadas (*Wrinkled Flamelets*):** A turbulência enrugam a frente de chama, mas sem penetrar sua estrutura interna. A chama ainda se comporta como uma frente laminar localmente;
- **Filmes de chama corrugados (*Corrugated Flamelets*):** Possui intensidade turbulenta é maior. A chama é enrugada por estruturas menores, mas ainda mantém a estrutura de chama laminar;
- **Superfície de reação (*Reaction Sheet*):** A turbulência começa a penetrar a zona de pré-aquecimento, mas a zona de reação química permanece intacta;
- **Reator bem misturado (*Well-Stirred Reactor*):** A turbulência é tão intensa que a chama perde completamente sua estrutura laminar e o regime se assemelha ao de um reator perfeitamente misturado.

A determinação da velocidade de queima turbulenta (S_T) é um aspecto essencial para prever o comportamento da chama em meios turbulentos. Diferentes modelos foram desenvolvidos para descrever a relação entre S_T e os parâmetros da turbulência. De acordo com o modelo de difusão turbulenta [Law, 2006], a velocidade de queima turbulenta pode ser expressa como:

$$S_T \sim \sqrt{D_T} \quad (2.9)$$

onde D_T é a difusividade turbulenta, que pode ser expressa como:

$$D_T \sim u'_o l_o \quad (2.10)$$

onde u'_o e l_o são, respectivamente, a velocidade característica da turbulência e a escala integral dos redemoinhos. Assim, a velocidade de queima turbulenta pode ser escrita como:

$$S_T \sim \sqrt{u'_o l_o} \quad (2.11)$$

E possui a seguinte relação:

$$\frac{S_T}{S_L} = \sqrt{\frac{u'_o l_o}{\nu}} = \sqrt{Re_o} \quad (2.12)$$

onde ν é a viscosidade cinemática, e Re_o representa o número de Reynolds turbulento na escala integral da turbulência.

Outra formulação amplamente utilizada relaciona a velocidade da chama turbulenta com a área da superfície da chama enrugada [Law, 2006]:

$$S_T A = S_L A_T \quad (2.13)$$

onde A_T é a área superficial da chama turbulenta. Essa expressão destaca que o aumento da área da frente de chama devido à turbulência leva a um aumento da velocidade de queima.

A análise da propagação da chama turbulenta é essencial para a compreensão da dinâmica de escoamentos reativos confinados, como aqueles que ocorrem em dutos contendo obstáculos internos. Nessas configurações, as interações entre a turbulência induzida pelos obstáculos e a frente de chama podem resultar em intensos processos de aceleração da chama, que devem ser monitorados pela iminência de passar por uma DDT.

2.8 Simulações de grandes escalas (LES)

A modelagem da turbulência desempenha um papel de suma importância na simulação numérica de processos de combustão em três dimensões, em específico em dutos confinados com a presença de obstáculos que influenciam a propagação da chama e as condições para a transição da deflagração para a detonação. Entre as diferentes metodologias de turbulência disponíveis, o modelo *Large Eddy Simulation* (LES) se faz uma abordagem precisa para capturar os fenômenos turbulentos que governam a interação entre a chama e os obstáculos estruturais.

Modelos tradicionais de turbulência, como o $k - \varepsilon$, apresentam dificuldades em representar com precisão os efeitos próximos à parede, o que compromete a fidelidade dos resultados numéricos. Nas pesquisas de Nguyen et al., 2021, o modelo $k - \varepsilon$ superestimou

significativamente a velocidade de propagação da chama em comparação com resultados experimentais, apresentando um avanço da frente de chama quatro vezes mais rápido do que o observado experimentalmente. Essa diferença está associada à incapacidade do modelo de capturar adequadamente os efeitos da turbulência perto das paredes, mesmo quando técnicas avançadas de tratamento de parede são empregadas. Como o presente estudo tem como objetivo a inclusão de obstáculos, a interação com as paredes se faz um fator primordial para a análise. A presença de camadas-limite formadas pelas paredes do duto tem um impacto crítico na dinâmica da chama [Nguyen et al., 2021], sendo essencial o uso de um modelo que consiga representar com maior precisão os efeitos de cisalhamento do fluido e as interações entre os vórtices gerados pelos obstáculos.

O modelo LES se mostra uma alternativa apropriada para a simulação da combustão turbulenta confinada. Nguyen et al., 2021, ao comparar diferentes metodologias de turbulência, o LES foi o único que conseguiu capturar adequadamente a rugosidade da frente de chama, mantendo tempos de simulação razoáveis. Essa metodologia permite resolver explicitamente as grandes escalas da turbulência, enquanto as menores escalas são modeladas através de submalhas apropriadas. Como resultado, o LES proporciona uma descrição mais detalhada da interação entre a chama e os obstáculos, possibilitando a previsão mais precisa de fenômenos como a amplificação da turbulência e o enrugamento da frente de chama, fatores que desempenham um papel crucial para esses casos.

Além das ponderações realizadas por Nguyen et al., 2021, Emami et al., 2015 relatam que o LES pode capturar melhor a DDT por conta de sua maior precisão quando se trata da simulação e captura de interações de ondas de choque. Essas incapacidades de captura se expandem para uma melhor captura das instabilidades dentro da metodologia de turbulência LES que modelos do RANS [Wang et al., 2023].

Embora o LES resolva versões filtradas espacialmente das equações governantes, das quais as grandes escalas são resolvidas diretamente, ainda existe uma necessidade da resolução das pequenas escalas. Para isso, as pequenas escalas são modeladas por modelos de submalha [Nguyen et al., 2021].

De acordo com Emami et al., 2015, embora os modelos SGS convencionais tenham sido amplamente desenvolvidos para escoamentos com turbulência de Kolmogorov, ainda não há um entendimento completo sobre o comportamento da turbulência em processos de DDT e no fenômeno de detonação. A turbulência presente nesses regimes pode não seguir a clássica

distribuição de escalas energéticas previstas pela teoria de Kolmogorov, o que levanta questionamentos sobre a adequação dos modelos SGS tradicionais para capturar a complexa interação entre turbulência e combustão nesses cenários. No entanto, Emami et al., 2015 ressaltam que os modelos convencionais embora não sejam perfeitamente compatíveis com a teoria de turbulência de Kolmogorov, isso não implica necessariamente que sejam inadequados para estudar a aceleração da chama e seus efeitos na turbulência. Assim, é essencial avaliar criticamente a capacidade desses modelos de submalha em reproduzir escoamentos onde a turbulência não segue a distribuição clássica de escalas.

Uma das abordagens mais comuns na modelagem SGS para escoamentos turbulentos reagentes é a hipótese do transporte por gradiente (*gradient transport assumption*), amplamente empregada na descrição dos fluxos de espécies químicas e de energia nas escalas não resolvidas da simulação [Emami et al., 2015]. Nesse contexto, o termo associado à difusão turbulenta pode ser interpretado como uma viscosidade de turbilhão, que representa os efeitos da turbulência SGS sobre a difusividade mássica, permitindo uma aproximação dos mecanismos de mistura e transporte de espécies químicas que ocorrem nas pequenas escalas [Emami et al., 2015]. Essa abordagem contribui para a descrição da interação entre a chama e a turbulência, auxiliando na modelagem da aceleração da chama e na caracterização das condições para a transição da deflagração para a detonação.

A escolha do modelo SGS é fundamental para a precisão da simulação da combustão turbulenta. De acordo com Chen et al., 2016, com o avanço da capacidade computacional e o uso de computação paralela, o LES tem se consolidado como uma ferramenta robusta para modelar a propagação da chama em câmaras obstruídas. Quando comparado a metodologia *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS), o LES oferece uma melhor representação da turbulência, resolvendo explicitamente as grandes estruturas turbulentas do escoamento enquanto modela as pequenas escalas. No entanto, para que essa abordagem seja eficaz na simulação da combustão, a escolha do modelo SGS apropriado continua sendo um dos aspectos mais críticos [Chen et al., 2016].

Dentre os modelos SGS disponíveis, o Smagorinsky-Lilly tem sido amplamente utilizado devido à sua capacidade de capturar a dissipação de energia da turbulência e fornecer uma abordagem eficaz para modelagem da viscosidade de submalha em escoamentos altamente turbulentos [Johansen e Ciccarelli, 2010].

Esse modelo foi originalmente desenvolvido para representar a viscosidade de submalha em simulações LES, permitindo que a dissipação de energia seja corretamente modelada nas escalas não resolvidas da malha. Segundo Nguyen et al., 2021, o Smagorinsky-Lilly é o modelo SGS mais simples e amplamente utilizado, pois consegue produzir resultados razoáveis para uma ampla gama de escoamentos. Sua versão dinâmica aprimora a precisão da modelagem ao atualizar o coeficiente Smagorinsky (C_s) com base nas escalas resolvidas do movimento, tornando-o mais adaptável às condições locais da turbulência. Embora o modelo *Wall-Adapting Local Eddy-viscosity* (WALE) seja mais eficaz para escoamentos próximos a paredes, o Smagorinsky-Lilly se destaca em escoamentos não homogêneos e métodos numéricos não estruturados, o que é esperado em escoamentos altamente turbulentos, como os observados em processos de combustão confinada [Nguyen et al., 2021]. Chen et al., 2026, reforçam a justificativa para a seleção do Smagorinsky-Lilly como SGS, destacando que ele permite capturar a dissipação de energia da turbulência entre as escalas resolvidas e não resolvidas.

Para descrever a evolução do escoamento turbulento e os fenômenos de combustão associados, o LES utiliza um conjunto de equações governantes. Essas equações são modificadas para incluir os efeitos das escalas submalha, que são modeladas por aproximações como o modelo Smagorinsky-Lilly. A correta formulação dessas equações é essencial para capturar a interação entre a frente de chama e a turbulência, garantindo previsões mais precisas do comportamento da combustão em meios confinados e com obstáculos.

Johansen e Cicarelli, 2014, apresentam as equações usadas no LES com a submalha Smagorinsky-Lilly, essas equações são apresentadas a seguir.

A equação da quantidade de movimento filtrada para LES é dada por:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial\tilde{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}(u_i\tilde{u}_j - \tilde{u}_i\tilde{u}_j)] \quad (2.14)$$

onde σ_{ij} é o tensor de tensões viscosas, que inclui os efeitos das viscosidades molecular e das tensões turbulentas resolvidas, o termo $\bar{\rho}(u_i\tilde{u}_j - \tilde{u}_i\tilde{u}_j)$ é o tensor da submalha, que modela as contribuições das escalas menores.

A conservação da entalpia sensível no contexto da LES é descrita por:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_s}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}_s}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} - \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} \right) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} (\widetilde{u_i h_s} - \tilde{u}_i \tilde{h}_s)] \quad (2.15)$$

onde \tilde{h}_s é a entalpia sensível filtrada, representando a energia térmica do fluido excluindo efeitos de referência de formação química, λ é a condutividade térmica do fluido, \tilde{T} representa a temperatura filtrada do fluido, já $\bar{\rho} (\widetilde{u_i h_s} - \tilde{u}_i \tilde{h}_s)$ representa o fluxo de entalpia da submalha, que modela o transporte de calor devido às escalas não resolvidas.

Para modelar a evolução das concentrações dos gases envolvidos na combustão, utiliza-se a equação de transporte de espécies:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} (\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)] \quad (2.16)$$

onde \tilde{Y}_k é a fração de massa da espécie química, D o coeficiente de difusão das espécies, já $\bar{\rho} (\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)$ representa o fluxo de espécies submalha, modelando o transporte das espécies devido às escalas turbulentas não resolvidas pelo método LES.

3 METODOLOGIA

Neste capítulo apresenta-se a descrição dos procedimentos adotados para a realização das simulações numéricas a fim se obter um modelo confiável para previsão da velocidade da frente de chama em dutos confinados.

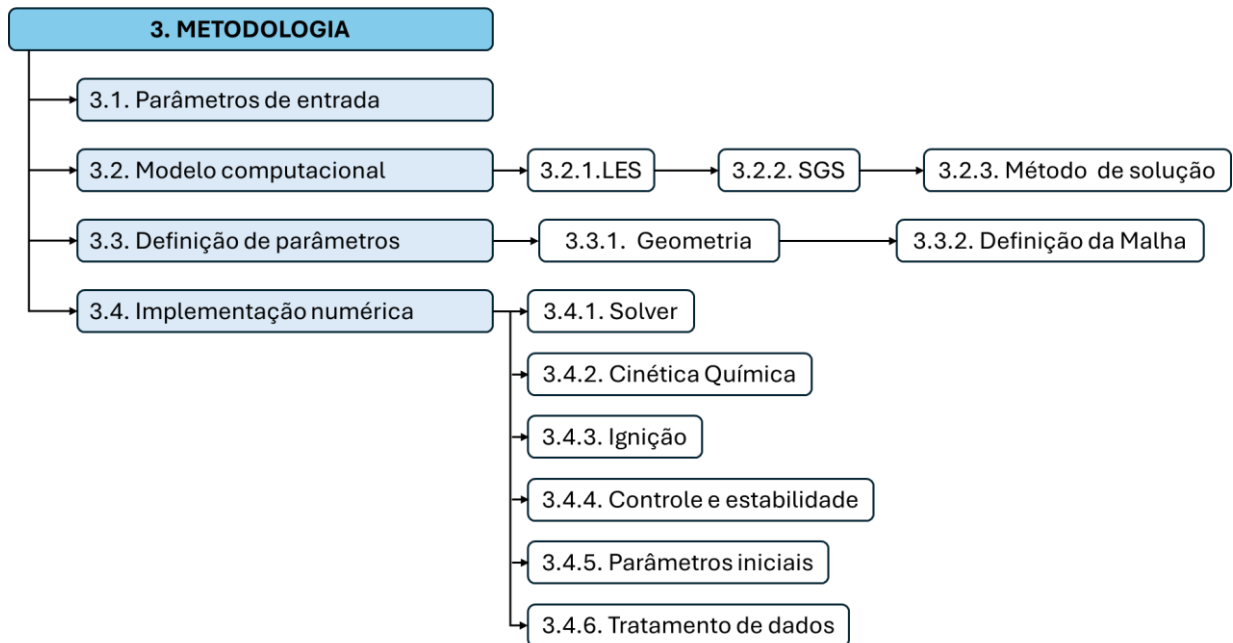


Figura 3.1 – Fluxograma da estrutura da metodologia empregada

A metodologia empregada no presente estudo foi organizada em quatro blocos principais, conforme indicado no fluxograma da Figura 3.1. O primeiro bloco, correspondente ao item 3.1, que apresenta os parâmetros a serem variados ao longo do estudo. Nessa etapa são definidas as condições que serão modificadas, por exemplo, diferentes valores de razão de bloqueio e de razão de equivalência da mistura.

O segundo bloco, descrito no item 3.2, trata do modelo computacional adotado. Nele são apresentadas as escolhas referentes ao método de simulação de grandes escalas (LES), ao modelo de submalha utilizado para representar os efeitos não resolvidos diretamente pela malha, e ao método de solução empregado, incluindo os esquemas de discretização e as estratégias numéricas adotadas.

O terceiro bloco, contemplado no item 3.3, aborda a geometria do problema e a configuração da malha computacional. Inicialmente, descreve-se a construção da malha e suas

principais características. Em seguida, são apresentados os procedimentos de qualificação da malha, que asseguram que o refinamento empregado seja suficiente para fornecer resultados consistentes e confiáveis, evitando erros numéricos significativos.

Por fim, o quarto bloco, correspondente ao item 3.4, que reúne as etapas de implementação numérica. Essa parte engloba a configuração do *solver* utilizado, a descrição da cinética química incorporada ao modelo, a estratégia adotada para a ignição da mistura, as medidas de controle e estabilidade necessárias para o bom andamento das simulações, a definição dos parâmetros iniciais, bem como o tratamento e a análise dos dados resultantes.

3.1 Parâmetros de entrada

A fim de mensurar o impacto de parâmetros na velocidade da frente de chama foram variadas as razões de equivalência e razão de bloqueio. As razões de equivalência simuladas foram equivalentes a 0,8; 1,0 e 1,2. Já as razões de bloqueio testadas foram de valores correspondentes a 0,3; 0,5 e 0,7.

Tabela 3.1- Parâmetros de entrada simulados.

Parâmetro	Símbolo	Valores testados
Razão de equivalência	Φ	0,8
		1,0
		1,2
Razão de bloqueio	BR	0,3
		0,5
		0,7

3.2 Modelo computacional

Para a investigação numérica da propagação da frente de chama em um duto confinado com obstáculos, foi selecionado um modelo computacional adequado à física do problema capaz de capturar os fenômenos envolvidos. A abordagem utilizada baseia-se no LES, que permite uma resolução mais detalhada das estruturas turbulentas de maior escala, enquanto os efeitos de submalha são modelados por meio do modelo Smagorinsky-Lilly, amplamente

empregado para representar a dissipação turbulenta em escoamentos reativos [Jahansen e Ciccarelli, 2010]. Essa escolha se deve ao fato de estudos como os efetuados por Nguyen et al., 2021, identificarem que demais metodologias, como RANS, podem superestimar valores da velocidade de frente de chama em até quatro vezes. A cinética química da combustão do hidrogênio foi considerada por meio de um mecanismo simplificado de 1 passo. A solução numérica das equações governantes foi realizada pelo método de resolução *Coupled*, adequado para escoamentos compressíveis e de alta complexidade. Os detalhes de cada um desses modelos são descritos nos tópicos seguintes.

3.2.1 Modelagem da turbulência

Para simular adequadamente a dinâmica da combustão e seus fenômenos, como liberação de calor devido a reação química e o escoamento propriamente dito, o módulo de energia foi ativado para considerar os efeitos térmicos. A equação utilizada para modelar o comportamento da energia está descrita a seguir [ANSYS Inc., 2021; Versteeg e Malalasekera, 2007]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \right) + \nabla \cdot \left(\rho v \left(h + \frac{v^2}{2} \right) \right) = \nabla \cdot \left(k_{eff} \nabla T - \sum_i h_j \vec{j}_j + \bar{\tau}_{eff} \cdot \vec{v} \right) + S_h \quad (3.1)$$

onde e é a energia interna específica, T é a temperatura, e \vec{v} , é o vetor velocidade e nessa equação contribui para o transporte convectivo. A entalpia específica h combina a energia interna com a pressão do fluido. A condutividade efetiva k_{eff} incorpora os efeitos térmicos laminares e turbulentos. Os fluxos difusivos das espécies químicas, representados por \vec{j}_j , são multiplicados pela entalpia específica h_j para considerar o transporte de energia devido às reações químicas. O tensor de tensões viscosas efetivas $\bar{\tau}_{eff}$ representa as forças internas associadas à dissipação de energia no fluido, enquanto S_h considera fontes adicionais de energia volumétrica, como liberação de calor de reações de combustão.

Após essa ativação, o modelo de turbulência selecionado para realizar a simulação foi o *Large Eddy Simulation* (LES), como mencionado anteriormente. Para casos de detonação turbulenta, tridimensional, e transiente torna-se uma opção adequada, além da revisão do estado da arte demonstrar que o seu uso é o que apresenta resultados mais próximos de dados

experimentais. Apesar da necessidade de maior capacidade de poder computacional, as vantagens em termos de capturar com maior precisão a física do fenômeno e de se adequar melhor ao problema compensam essa desvantagem.

3.2.2 Modelos de Submalha (SGS)

O modelo de submalha (*Subgrid-Scale Model* - SGS) adotado foi o Smagorinsky-Lilly. Esse submodelo calcula a viscosidade turbulenta com base na deformação e rotações locais, adaptando-se a interações com as paredes. A submalha WALE apresenta boa compatibilidade para representar os fluxos próximos à parede, porém o fator da submalha Smagorinsky-Lilly se destaca em escoamentos não homogêneos, como já citado anteriormente, faz com que seja uma opção mais adequada ao presente problema.

A equação utilizada para resolução a viscosidade turbulenta no modelo LES (e sua submalha Smagorinsky-Lilly) é dada a seguir [ANSYS Inc., 2021; Versteeg e Malalasekera, 2007]:

$$\mu_t = \rho L_s^2 |\bar{S}| \quad (3.2)$$

onde o termo μ_t representa a viscosidade turbulenta usada para modelar os efeitos de escala submalha em simulações LES, $|\bar{S}| \equiv \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}}$ é o módulo do tensor de taxa de formação média filtrada, \bar{S}_{ij} é o tensor de taxa de deformação média no campo resolvido, responsável pela contribuição de grandes escalas de movimento no fluxo turbulento, e L_s é a escala de comprimento característica ajustada localmente para garantir uma descrição precisa do comportamento viscoso próximo às paredes.

Na Equação 3.3 a escala de comprimento característico é definida pela seguinte equação [ANSYS Inc., 2021; Johansen e Ciccarelli, 2010; Chen et al., 2016]:

$$L_s = \min(kd, C_s \Delta) \quad (3.3)$$

onde k é a constante de von Kármán, e é equivalente a 0,41, d é a distância até a parede, já C_s é uma constante empírica denominada como constante Smagorinsky, definida sendo

equivalente a 0,1 por Lilly [Johansen e Ciccarelli, 2010]. Por fim, Δ é computado de acordo com o volume da célula analisada, logo $\Delta = V^{1/3}$, onde V é o volume.

Em relação ao tratamento próximo à parede (*Near-Wall Treatment*) foi adotada a abordagem Werner-Wengle pelo fato de que essa abordagem mistura as funções de parede linear e logarítmica para garantir o comportamento assintótico correto em diferentes regiões do fluxo próximo à parede.

Por fim, em relação ao modelo de turbulência adotado, as constantes adotadas foram as seguintes [Johansen e Ciccarelli, 2010]:

- C_s : 0,1 (adotado como constante);
- Energy Prandtl Number: 0,85;
- Wall Prandtl Number: 0,85.

3.2.3 Método de solução numérica

A método de resolução no ANSYS Fluent é dividido em duas categorias, sendo elas a *Pressure-Based Solver* e a *Density-based Solver*. O primeiro método resolve a equação de pressão-velocidade de forma acoplada ou segregada e possui boa compatibilidade para escoamentos incompressíveis e de leve compressibilidade. Pode ser considerada leve compressibilidade situações em que a massa específica varia tipicamente entre 5 e 10% e com um número de Mach entre 0,3 e 0,5. As limitações, em relação a compressibilidade, podem ser ultrapassadas por meio da seleção de um método de resolução adequado. Em simulações com escoamentos de baixa variação de massa específica, o *Pressure-Based Solver* pode ser mais robusto e eficiente. Um fato que deve ser ponderado é que apesar desse método não ser o ideal para esses casos, o mesmo possui subdivisões em métodos que podem compensar deficiências [ANSYS Inc., 2021].

Por outro lado, o *Density-based Solver* resolve as equações de conservação de massa, momento e energia de forma fortemente acoplada para considerar a variações na massa específica. Pode ser uma escolha robusta quando o intuito é a consideração de escoamentos compressíveis e que apresentam ondas de choque. As desvantagens são seu maior custo operacional, uma maior sensibilidade a ajustes numéricos, e por fim, a ausência da funcionalidade de ignição por fagulha, que para o presente estudo se faz muito relevante [ANSYS Inc., 2021].

O ANSYS Fluent possui uma seção na qual o acoplamento de *Pressure-Based Solver* é controlado. Nessa seção é possível determinar o esquema de discretização e a formulação do tempo na simulação. Métodos mais robustos e adequados a natureza do problema podem gerar resultados que sejam mais condizentes com a física real da situação e mais confiáveis. Desta forma, a definição adequada de métodos de solução faz-se uma etapa fundamental na confiabilidade do sistema.

Para o tipo de resolução *Pressure-Based Solver*, tem-se quatro métodos, o *Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations* (SIMPLE), *SIMPLE Consistent* (SIMPLEC), *Pressure Implicit with Splitting of Operators* (PISO), e por fim, o *Coupled*.

O SIMPLE é um método iterativo semi-implícito, como o próprio nome diz, ideal para escoamentos incompressíveis e com baixa variação de pressão [Versteeg e Malalasekera, 2007; Moukalled et al., 2016]. Para a presente pesquisa, por se tratar de um caso que possui escalas temporais rápidas e escoamentos reativos, transientes e compressíveis, esse método não se justifica.

O método SIMPLEC é uma variante do SIMPLE com convergência acelerada, possuindo ainda as limitações de seu sucessor, porém com baixo tempo de convergência. O SIMPLEC se faz útil em problemas fortemente acoplados [Versteeg e Malalasekera, 2007; Moukalled et al., 2016]

O PISO é mais avançado se comparado aos modelos anteriores, e foi desenvolvido para lidar especificamente com escoamentos transientes que possuem interações de elevada magnitude de pressão e velocidade. Esse método é mais adequado para lidar com escoamentos compressíveis e ondas de choque [ANSYS Inc., 2021; Versteeg e Malalasekera, 2007; Moukalled et al., 2016]. Sua desvantagem está em seu elevado custo computacional para problemas de elevada complexidade, sendo apesar desse fator uma escolha mais adequada para o presente estudo se comparado com o SIMPLE e SIMPLEC.

Por fim, o *Coupled* resolve simultaneamente os campos de pressão e velocidade, e dessa forma garante uma convergência mais rápida e robusta [ANSYS Inc., 2021]. Porém, por esse motivo ele exige uma capacidade de armazenamento na memória RAM mais elevado. Suas vantagens são na resolução de problemas compressíveis e com ondas de choque, e em situações de variações bruscas de pressão (como no estudo proposto). Por conta desses fatores o método de resolução *Pressure-Based Solver* que se adequa melhor as capacidades computacionais disponíveis é o *Coupled*, sendo assim o método selecionado para a presente pesquisa.

Em relação a discretização espacial, foram adotadas as seguintes configurações:

- Gradiente: Método dos Mínimos Quadrados Baseado em Células (Least Squares Cell-Based);
- Pressão: Segunda Ordem (Second Order);
- Momento: Diferenciação Central Limitada (Bounded Central Differencing);
- H2: Esquema de Segunda Ordem Upwind (Second Order Upwind);
- O2: Esquema de Segunda Ordem Upwind (Second Order Upwind);
- H2O: Esquema de Segunda Ordem Upwind (Second Order Upwind);
- Energia: Esquema de Segunda Ordem Upwind (Second Order Upwind).

O custo computacional é um fator de suma importância em simulações numéricas, e por esse motivo, a fim de otimizar a quantidade de simulações feitas, foram utilizados três computadores. As especificações de cada um deles está descrita a seguir:

Tabela 3.2- Especificações das máquinas utilizadas para a simulação.

Especificação	Máquina 1	Máquina 2	Máquina 3
Memória RAM	16	16	8
CPU	AMD Ryzen 7 5800H	AMD Ryzen 7 5700G	Intel core i5-7400
Núcleos do CPU	8	8	4
Fluxos do CPU	16	16	4
Frequência base	3,2 GHz	3,8 GHz	3,0 GHz
Frequência máxima	4,4 GHz	4,6 GHz	3,5 GHz

Por conta do menor poder computacional, a máquina 3 foi restrita a simulações pontuais, sendo adotado o uso majoritário das demais máquinas que apresentaram poder computacional aceitável para o problema proposto.

3.3 Definição de parâmetros

3.3.1 Geometria

O desenvolvimento das geometrias utilizadas nesta pesquisa foi realizado no software Solid Edge. A motivação da escolha deste software se deve a sua interface intuitiva e facilidade de uso, além de oferecer ferramentas que permitem a criação de modelos tridimensionais precisos, extração de desenhos técnicos e edição eficiente de dimensões geométricas. Tendo em vista que a presente pesquisa faz uso das alterações de dimensões críticas, softwares validados para criação de geometrias tridimensionais de fácil edição se fazem de extrema utilidade. A escolha deste software se mostrou vantajosa para a necessidade de modelagem que permita alterações rápidas nas dimensões dos obstáculos e do duto, fundamentais para a análise deste estudo.

Foram modeladas quatro geometrias tridimensionais distintas com o intuito de efetuar a investigação da propagação da frente de chama e sua respectiva interação com as barreiras adicionadas. A partir dos resultados das simulações, faz-se possível a mensuração dos efeitos na velocidade de frente de chama nas geometrias investigadas.

A primeira geometria gerada se trata de um duto simples sem a inclusão dos obstáculos. Esse duto é adotado como sendo uniforme e contínuo, sem alteração na seção transversal e na razão de bloqueio. Essa geometria foi gerada com o intuito de mensurar a velocidade da frente de chama sem interferências, validando de modo qualitativo e quantitativo, além de servir como base comparativa para análises posteriores, tornando possível a quantificação dos ganhos de velocidade com a inclusão dos obstáculos.

As dimensões adotadas para a geometria estão dispostas na Figura 3.2, onde estão descritas as dimensões em relação à ignição. As dimensões adotadas foram selecionadas a fim de serem compatíveis com os dados experimentais feitos por Jiang et al., 2024. Essa compatibilidade dimensional possibilita uma comparação do modelo numérico gerado com dados experimentais, dando confiabilidade ao sistema adotado.

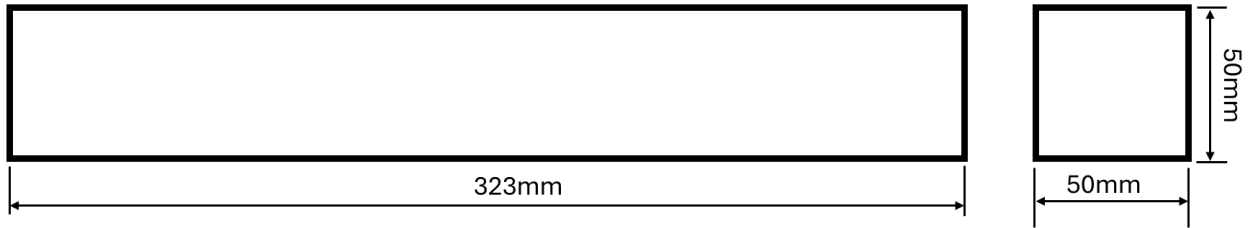


Figura 3.2 – Dimensões da geometria sem obstáculos

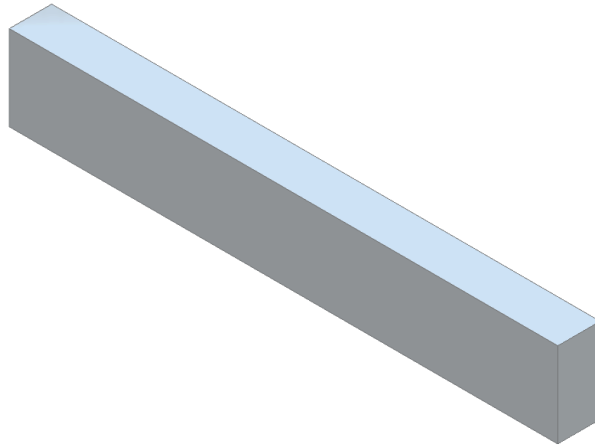


Figura 3.3 – Geometria tridimensional seccionada do duto simples na vista isométrica.

A primeira geometria com obstáculo possui uma configuração de barreiras tipo “degrau” com 1 obstáculos distanciado a 102 mm da ignição. Já a ignição foi posicionada a distância de 47 mm de uma das faces. As dimensões dos obstáculos são influenciadas pelo valor da razão de bloqueio. A fim de gerar um menor custo computacional, as geometrias foram geradas de forma seccionada e posteriormente aplicada a condição de simetria. A posição do obstáculo pode ser observada na Figura 3.4 Já, a geometria gerada dentro do software Solid Edge está presente na Figura 3.5.

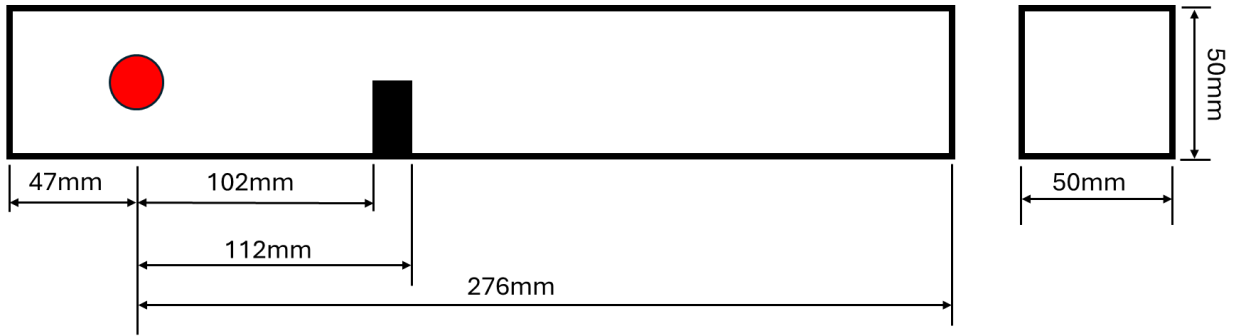


Figura 3.4 – Dimensões da geometria com obstáculos

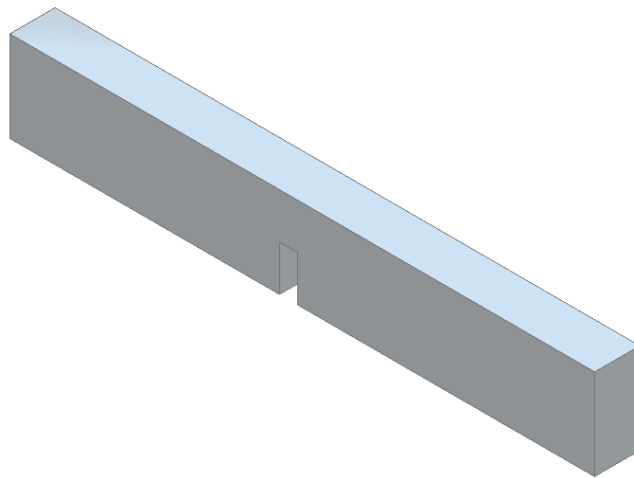


Figura 3.5 – Geometria tridimensional seccionada do duto com obstáculo de razão de bloqueio equivalente a 0,5

3.3.2 Definição da Malha

As geometrias tridimensionais, que foram desenvolvidas no software Solid Edge, foram salvas em um formato que é reconhecido pelo ANSYS, sendo assim salvas como STEP (.stp). Após a importação das geometrias para o ANSYS, foi assegurado que elas permaneceram com sua integridade intacta, assim garantindo uma preparação da malha adequada dentro do ambiente de geração de malha do ANSYS.

3.3.2.1 Condições de parede

O primeiro passo adotado dentro da geração de malha foi delimitar as zonas que são paredes, para isso foram selecionadas todas as faces das geometrias e nomeadas como “*wall*”. Essa ação deve ser realizada para que dentro do Fluent, em *setup*, o próprio software compreenda as zonas como sendo limitantes como paredes. Para as paredes foi considerado a condição de parede adiabática e *no-slip*. Essa condição foi considerada viável levando em consideração os estudos de Xiao et al., 2014, que aferiram que essa condição é viável na representação das morfologias características da frente de chama em dutos confinados. Além da delimitação das zonas que são paredes, foi selecionada a face de simetria. A face de simetria permite com que seja apenas simulada metade da geometria e os resultados obtidos sejam replicados. Embora o fenômeno analisado seja tridimensional e elevada complexidade, os ganhos em poder computacional com essa seleção a tornaram necessária. Não foram obtidas divergências expressivas quando comparados os dados para o caso seccionado e de geometria completa, residindo em valores inferiores a 5%.

Além das simplificações já adotadas, as paredes do duto foram consideradas lisas, uma vez que esse parâmetro não é foco do presente estudo. As paredes do duto foram consideradas adiabáticas e não foi considerada a radiação na presente pesquisa.

3.3.2.2 Tamanho de elementos

A malha foi gerada com elementos hexaédricos pelo fato de possuírem melhor adequação à geometria de seção retangular. Essa melhor adequação se deve ao fato de elementos de malha similares a cubos possuírem distorções menores. A magnitude inferior dessas distorções gera menos problemas de divergência. Foi adotado um tamanho de elemento equivalente a 0,74mm, logo as arestas alvo dos elementos hexaédricos são equivalentes a 0,74mm. Uma análise de malha foi realizada a fim de determinar a divergência gerada pelo refinamento. Os estudos conduzidos por Jiang et al., 2024, fizeram uso de elementos de malha de tamanho de 1mm, indicando que valores iguais ou inferiores são o suficiente para gerar simulações com boa compatibilidade em relação a dados experimentais.

Por conta de uma limitação de hardware, o tamanho dos elementos de malha usados nas simulações foram de 0,74mm. Elementos menores exigiriam custos computacionais mais elevados e indisponíveis para o presente estudo.

Fazendo uso das configurações para geração da malha, os valores da quantidade de elementos de malha para cada uma das geometrias geradas estão presentes na Tabela 3.3:

Tabela 3.3 – Valores da quantidade de nós e elementos para cada geometria.

Geometria	Sem obstáculo	BR = 0,3	BR = 0,5	BR = 0,7
Nós	1.057.770	1.048.670	1.042.300	1.036.385
Elementos	1.010.344	1.000.824	994.160	987.972

3.3.2.3 Qualificação da malha

A fim de aferir a qualidade da malha gerada foram utilizadas métricas disponíveis dentro do software ANSYS para avaliação da malha. Algumas das métricas disponíveis são de *Aspect Ratio*, *Skewness* e *Orthogonal Quality*. Essas três ferramentas possibilitam identificar previamente pontos de possível instabilidade numérica. As faixas consideradas como aceitáveis para cada uma das métricas são fornecidas pelo guia de usuário da ANSYS Inc., 2021. As imagens usadas para exemplificar as métricas de validação de malha, foram geradas com a geometria que possui BR equivalente a 0,7. A motivação dessa escolha se deve ao fato desse ser o caso que apresenta as maiores distorções em relação as métricas qualitativas de malha empregadas.

Além das métricas utilizadas, avaliação por meio da *Measure of Turbulence Resolution*, pode se fazer muito eficaz, uma vez que quantifica a qualidade em que a turbulência está sendo resolvida pela LES, baseada exclu-

sivamente no balanço entre energia cinética turbulenta resolvida e residual. Seu valor pode ser considerado como sendo aceitável para os casos em que 80% da energia turbulenta seja resolvido [Pope, 2003]. Essa métrica não será avaliada no presente estudo, mas prevê-se o uso em futuras pesquisas.

O *Aspect Ratio* mede a proporção entre o maior e o menor comprimento característico de um elemento. Aspectos muito desproporcionais podem indicar que o elemento está distorcido ou deformado, que por consequência podem levar a erros numéricos ou dificuldades de convergência da solução. Elementos totalmente proporcionais possuem seu *Aspect Ratio* equivalente a 1 (como cubos). Já elementos com valores entre 3 e 5 são considerados aceitáveis e apresentando dificilmente problemas de convergência. Valores altos, como acima de 10, por sua vez, necessitam de um refinamento ou redistribuição. Para a malha gerada, o resultado da análise de *Aspect Ratio* obtido está apresentado na Figura 3.6.

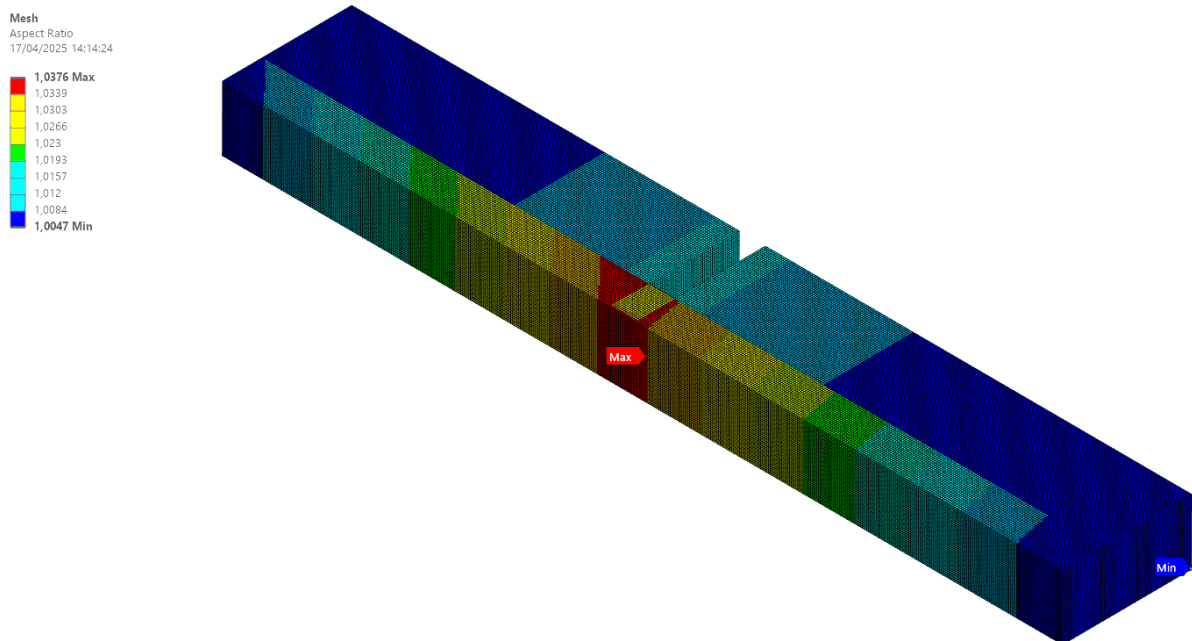


Figura 3.6 – Vista isométrica com a funcionalidade de *Aspect Ratio* acionada.

Faz se perceptível na Figura 3.6 que os pontos de maior valor de *Aspect Ratio* foram equivalentes a 1,0376. Essa medida foi adotada como satisfatória para início das simulações.

Outro aspecto analisado foi o *Skewness*, que mede o grau de desvio de um elemento em relação a sua forma ideal. Uma forma ideal, para essa aplicação, é definida como sendo uma que apresente ângulos internos iguais, como quadrados para elementos quadriláteros. Valores elevados de *Skewness* indicam elementos distorcidos, que assim como valores elevados de *Aspect Ratio* apresentam alto grau de distorção. A *Skewness* é especialmente relevante em malhas não estruturadas e em elementos curvados em geometrias complexas. Sua escala vai de 0 a 1, sendo 0 um elemento totalmente proporcional, entre 0,25 e 0,5 sendo aceitável e por fim

elementos com valores superiores a 0,9 apresentam elevado grau de distorção e são inadequados para simulações. A Figura 3.7 apresenta o grau de *Skewness* em cada elemento na malha gerada.

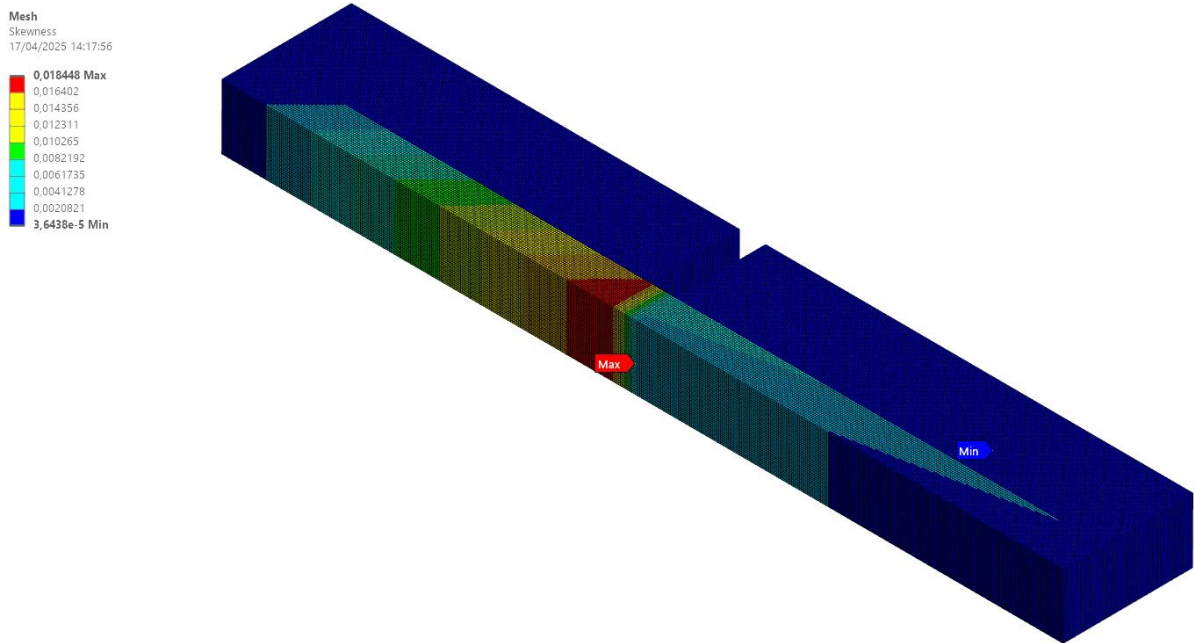


Figura 3.7 – Vista isométrica com a funcionalidade de *Skewness* acionada.

Os valores de maior magnitude para o *Skewness* são de 0,018448, esse valor foi considerado aceitável para o início das simulações.

Por fim, o último parâmetro utilizado para aferir a qualidade da malha é o *Orthogonal Quality*. Essa funcionalidade quantifica o alinhamento entre os vetores normais das faces de um elemento e suas direções principais do volume controlado associado. Essa métrica avalia com eficiência a ortogonalidade dos elementos em relação ao fluxo ou gradiente da solução. Um mal alinhamento desses vetores influencia diretamente a precisão dos cálculos numéricos, sendo crucial para métodos CFD nos quais o alinhamento da malha com os fluxos é crítico para minimizar erros de interpolação.

Valores ideais para a medida de *Orthogonal Quality* são de 1 (indicam um alinhamento perfeito) e a faixa de 0,7 e 0,85 é aceitável. Valores inferiores a 0,7 acabam sendo prejudiciais e necessitam um reposicionamento da malha. O resultado dessa análise é apresentado na Figura 3.8.

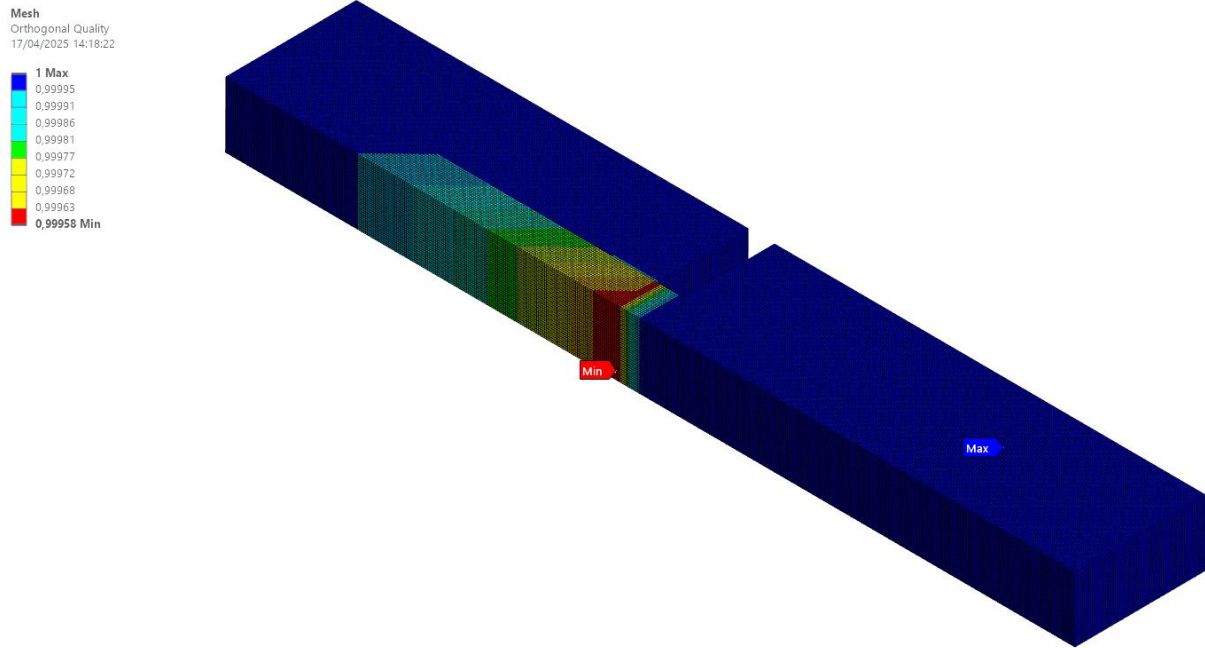


Figura 3.8 – Vista isométrica com a funcionalidade de *Orthogonal Quality* acionada.

Para esse parâmetro o valor mínimo obtido foi equivalente a 0,99958 que foi considerado aceitável para prosseguir com as simulações.

Realizada a avaliação da qualidade para três parâmetros diferentes da malha, todas as análises apresentaram resultados dentro de uma faixa próxima ao ideal para obtenção de resultados consistentes e sem que existam problemas de convergência devido a deformidade de elementos. A Tabela 3.3 apresenta os valores mínimos e máximos de cada critério de avaliação de qualidade de malha para as 4 geometrias geradas.

Tabela 3.4 – Valores máximos e mínimos dos critérios de qualidade de malha para cada geometria gerada.

Parâmetro	Sem obstáculo		BR = 0,3		BR = 0,5		BR = 0,7	
	Máximo	Mínimo	Máximo	Mínimo	Máximo	Mínimo	Máximo	Mínimo
Aspect Ratio	1,0052	1,0052	1,0294	1,0047	1,0294	1,0007	1,0376	1,0047
Skewness	1,3e-10	1,30e-10	0,0079	3,08e-5	0,0111	1,30e-10	0,01845	3,6e-5
Orthogonal Quality	1,0000	1	1	0,9999	1	0,9998	1	0,9996

3.4 Implementação e solução numérica do modelo

Com a geometria criada e sua respectiva malha implementada, faz-se possível a iniciação do módulo Fluent para dar início ao *setup* da simulação numérica. Iniciando o *Launcher* do Fluent foi selecionado como opção o *Double precision*. Essa seleção faz com que os cálculos sejam realizados com maior precisão (64 bits) em vez de caso a opção não seja selecionada (32 bits). Esse fator gera um maior número de dígitos significativos para representar os números nas operações matemáticas, que por consequência gera uma necessidade maior de capacidade computacional (exigindo uma memória RAM de maior capacidade de armazenamento). Apesar dessa maior demanda, os benefícios de redução de erros numéricos, melhor estabilidade e maior precisão em representar e calcular fenômenos físicos fazem com que seja uma opção necessária para confiabilidade dos resultados da simulação.

Além do opcional de *Double Precision*, o número de processos paralelos que foram utilizados para resolver as equações foi selecionado como sendo equivalente a 4. Desta forma o solver divide o trabalho computacional em múltiplos núcleos da CPU para acelerar os cálculos.

3.4.1 Seleção do *solver*

O modelo foi configurado como um problema transiente para capturar os fenômenos temporais associados à propagação da frente de chama e uma possível transição de deflagração para detonação. O solver utilizado foi o *Pressure-Based Solver*, por ser mais adequado para resolução numérica que envolve escoamentos compressíveis e reações químicas. Outro fator que justifica sua utilização é o fato de possuir a possibilidade de incluir uma fagulha para dar ignição a reação.

A formulação transiente adotada foi de *First Order Implicit*. A equação que descreve o modelamento transiente no ANSYS Fluent para o solver *Pressure-Based* está descrita em ANSYS Inc., 2021, e em Versteeg e Malalasekera, 2007, e é representada pela Equação 3.4.

$$\int_V \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \oint \rho \phi \vec{v} \cdot d\vec{A} = \oint \Gamma_\phi \nabla \phi \cdot d\vec{A} + \int_V S_\phi dV \quad (3.4)$$

onde φ é a variável transportada que pode representar concentração de espécies ou energia, ρ é a massa específica do fluido que depende da mistura local de hidrogênio e ar, e t é o tempo em que a evolução do sistema ocorre. O termo \vec{v} refere-se ao vetor velocidade, que é fortemente influenciado pela interação da frente de chama com os obstáculos do duto. Já dV representa o volume infinitesimal, e $d\vec{A}$ é o elemento de área na interface de controle. Γ_φ é o coeficiente de difusão que rege os processos difusivos para φ , e $\nabla\varphi$ é o gradiente espacial da variável transportada. Por fim, S_φ é o termo fonte que inclui a taxa de liberação de energia térmica e espécies devido à combustão do hidrogênio.

3.4.2 Mecanismo de cinética química

O transporte de espécies químicas no processo de combustão utilizado para a simulação faz uso do módulo *Species Transport*. Esse módulo foi configurado para o modo volumétrico (*Volumetric*) e para a interação turbulência-química por meio do modelo *Finite-Rate/Eddy-Dissipation*. Este modelo possui como característica capturar a complexa interação entre os efeitos turbulentos e as reações químicas em sistemas confinados, que se justifica na presente pesquisa já que a interação com as paredes (que ampliam a turbulência) pode gerar alterações significativas. A equação governante do transporte das espécies químicas utilizado é dada pela seguinte equação [ANSYS Inc., 2021; Versteeg e Malalasekera, 2007]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (3.5)$$

onde Y_i é a fração mássica da espécie i , e \vec{v} é o vetor velocidade responsável pelo transporte convectivo. O termo \vec{J}_i descreve o transporte difusivo da espécie i devido a gradientes de concentração, enquanto R_i contabiliza os efeitos químicos, como o consumo de reagentes e a formação de produtos na combustão. Por fim, S_i é um termo fonte adicional que pode incluir injeção de massa ou outros efeitos externos.

Para a interação turbulência-química (*Finite-Rate/Eddy-Dissipation*) o termo que contabiliza os efeitos químicos possui seu comportamento descrito pelas seguintes equações [ANSYS Inc., 2021; Motaghian e Beji, 2023]:

$$R_{i,r} = (v_{i,r}'' - v_{i,r}') M_{w,i} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min_{\mathcal{R}} \left(\frac{Y_{\mathcal{R}}}{v_{\mathcal{R},r}' M_{w,\mathcal{R}}} \right) \quad (3.6)$$

$$R_{i,r} = (v_{i,r}'' - v_{i,r}') M_{w,i} A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j^N v_{j,r}'' M_{w,i}} \quad (3.7)$$

onde $v_{i,r}''$ e $v_{i,r}'$ são os coeficientes estequiométricos da espécie i como produto e reagente, respectivamente, que definem o balanço químico da reação. O termo $M_{w,i}$ converte a taxa molar para uma taxa mássica. O fator $\frac{\varepsilon}{k}$ ajusta a taxa de reação para incluir os efeitos da mistura turbulenta, onde ε é a taxa de dissipação turbulenta e k é a energia cinética turbulenta. As constantes A e B controlam a intensidade relativa da reação (equivalentes a 4 e 0,5 respectivamente na presente pesquisa). A Equação 3.6 é mais sensível à disponibilidade de reagentes específicos, enquanto a Equação 3.7 considera a influência cumulativa de produtos no domínio.

O mecanismo de passo único utilizado para a presente pesquisa está presente na Equação 2.3, apresentada anteriormente. Esse equacionamento se diferencia do mecanismo utilizado por Gamezo et al., 2007, uma vez que o mecanismo usado na presente pesquisa utilizou a equação de Arrhenius para o coeficiente de taxa de reação. Já Gamezo et al., 2007, modelou por meio da taxa de produção de espécies, como demonstrado na Equação 3.8.

$$\omega = A_m \rho Y \exp \left(-\frac{E_{a,m}}{RT} \right) \quad (3.8)$$

onde ω é a taxa de produção para a espécie m , A_m representa o fator pré-exponencial, ρ a massa específica, T a temperatura, $E_{a,m}$ a energia de ativação, Y a fração de massa de reagente não queimado, e por fim, R representa a constante universal dos gases.

Para os parâmetros envolvidos na equação de Arrhenius foram utilizados valores para um mecanismo cinético de 1 passo presentes na Tabela 3.5. Também foram incluídos os valores dos parâmetros utilizados por Gamezo et al., 2007, embora a unidade de medida para o fator pré-exponencial seja divergente. Os valores utilizados no presente estudo foram extraídos da biblioteca disponibilizada pelo Fluent para reações de hidrogênio e ar.

Tabela 3.5 – Valores utilizados na equação de Arrhenius

Propriedade	Grandeza			
	Presente estudo		Gamezo et al., 2007.	
Fator pré-exponencial (A_m)	9,87x10 ⁸	kmol/m ³ s	6,85x10 ¹²	cm ³ /g s
Temperatura inicial (T_0)	288,16	K	293,00	K
Expoente da temperatura (n)	0		-	
Energia de ativação ($E_{a,m}$)	3,1x10 ⁷	J/kmol	1,4x10 ⁷	J/kmol
Constante universal dos gases (R)	8,314	J kmol ⁻¹ K ⁻¹	8,314	J kmol ⁻¹ K ⁻¹

Foi feito o uso de uma equação simplificada de um mecanismo cinético de 1 passo para a equação de Arrhenius a fim de gerar menor custo computacional, tendo em vista que caso fossem feito o uso de mecanismo completos o tempo de processamento ampliaria significativamente, inviabilizando testes diversos.

3.4.3 Ignição

A fim de dar início a reação que envolve o hidrogênio e o ar dentro da câmara de combustão, faz-se necessário a introdução de uma ignição. Essa ignição pode ser gerada por meio da funcionalidade de *Spark Ignition*. Essa funcionalidade gera uma fagulha em um determinado ponto com uma energia mensurada em Joule. A posição da fagulha foi definida com uma distância de 47mm de uma das faces da geometria (como apresentado na Figura 3.9), possuindo as coordenadas (0,047; 0,025; 0) em metros. A energia liberada pela fagulha ao sistema foi definida como tendo 1 mJ, uma vez que não se observou variação significativa para valores dentro dessa ordem de grandeza. Sua duração foi definida como 1ms, usando como referência a duração usada por Mei et al., 2023. A definição da posição da fagulha foi adotada de acordo com os testes experimentais conduzidos por Jiang et al., 2024.

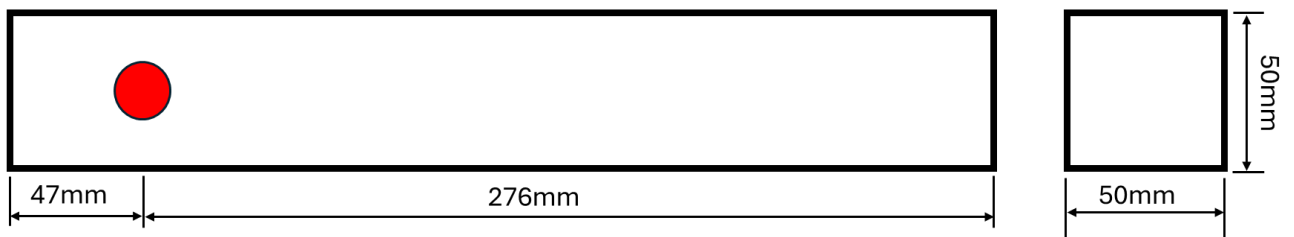


Figura 3.9 – Posição da fagulha que dá início a reação.

A equação 3.9 descreve a velocidade de propagação radial da chama, já a equação 3.10 define o termo para efeitos turbulentos na propagação da frente de chama [ANSYS Inc., 2021; Carrier et al., 1991].

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\rho_u}{\rho_b} S_t \quad (3.9)$$

$$S_t = \max(S_l, S_t(r)) \quad (3.10)$$

onde ρ_u representa a massa específica do fluido não queimado, que é maior devido à ausência de dilatação térmica, e ρ_b corresponde à massa específica do fluido queimado, reduzida pelo aumento de temperatura na combustão. O termo S_t incorpora os efeitos turbulentos na propagação da chama, enquanto S_l representa a velocidade de propagação laminar da chama. O valor de $S_t(r)$ depende do desenvolvimento espacial da chama e dos efeitos locais de turbulência, influenciando a aceleração da frente de chama.

Foram explorados dois modelos de velocidade de chama, o *Turbulent Length* e o *Turbulent Curvature*. O primeiro, se ajusta a velocidade da chama baseando-se no comprimento de escala turbulenta, que por sua vez assume uma propagação de chama como sendo influenciada pela intensidade da turbulência local. Além desses fatores, o *Turbulent Length* possui bom equilíbrio em termos de custo computacional se comparado aos demais modelos. Uma desvantagem deste modelo é o fato dele não capturar efeitos de curvatura ou distorções da frente de chama tão precisamente quanto o modelo *Turbulent Curvature*.

O *Turbulent Curvature* considera o efeito da curvatura da frente de chama em um escoamento turbulento. Tal fator faz com que a velocidade da chama seja ajustada de acordo com a curvatura local e o nível de turbulência, permitindo capturar frentes de chama distorcidas. Porém possui como sua maior desvantagem o custo operacional, sendo uma opção que deve ser avaliada mediante ao nível de precisão necessária para a simulação.

Considerando o melhor equilíbrio entre precisão e custo operacional dos modelos para fagulha de ignição (*Spark Ignition*), a presente pesquisa deu prioridade ao *Turbulent Length* para dar prosseguimento as simulações, mas explorará ambos.

3.4.4 Controle e estabilidade numérica

Para garantir a convergência e estabilidade do processo iterativo, a escolha de parâmetros adequados para o controle de simulação tem um papel crucial para alcançar resultados válidos. Para essa determinação, primeiro faz-se necessário à adoção de um valor para o *Flow Courant Number*, que é um número adimensional para medir a estabilidade de uma solução envolvendo escoamentos transientes. No *solver pressure-based*, (que foi o utilizado no presente estudo), o Courant atua como parâmetro de estabilização e convergência, influenciando o avanço interno (pseudo-temporal), assim se correlaciona com os fatores de sub-relaxação.

No presente estudo, foi adotado um valor de 0,1 para o *Flow Courant Number*. Esse valor conservador reduz oscilações numéricas e favorece convergência suave, sendo considerado adequado para simulações de escoamentos reativos, onde a evolução da chama e a interação entre os campos de velocidade e temperatura exigem uma discretização temporal precisa.

Outro parâmetro de suma importância é o fator de sub-relaxação, que controla a taxa de atualização das variáveis durante o processo iterativo de resolução das equações de conservação. O método de sub-relaxação ajusta a quantidade de correção aplicada a cada iteração, evitando grandes oscilações nas variáveis que poderiam comprometer a convergência. Neste estudo, os seguintes fatores de sub-relaxação foram utilizados:

- Pressão: 0,1;
- Momento: 0,1;
- Energia: 0,1;
- Espécies: 0,1.

Esses valores são considerados adequados para os casos de escoamentos reativos e transientes uma vez que existem mudanças abruptas nas variáveis que geram instabilidades. A escolha de um fator de sub-relaxação conservador (equivalente a 0,1) garante que a solução numérica seja suavizada e venha a convergir de maneira estável. Embora fatores de sub-relaxação mais altos possam ser utilizados para acelerar a convergência em certos tipos de simulação, valores baixos são recomendados para manter a precisão, particularmente em casos em que a dinâmica da chama é sensível às variações locais.

Já o critério de convergência dos resíduos é utilizado para determinar quando a solução numérica atingiu um estado estável, ou seja, quando as variações nas variáveis de interesse, entre iterações sucessivas, se tornam suficientemente pequenas a partir de um valor estabelecido. Para o presente estudo foram adotados os seguintes valores para o critério de convergência:

- Continuidade: 10^{-6} ;
- Momento: 10^{-6} ;
- Energia: 10^{-6} ;
- Espécies: 10^{-6} .

Esses critérios são adequados para garantir que a solução numérica seja precisa sem exigir um número excessivo de iterações, o que poderia aumentar significativamente o tempo de computação. Valores dessa ordem de grandeza foram selecionados como um nível de precisão que assegura a convergência dos cálculos para os parâmetros do escoamento.

Definidos os fatores de sub-relaxação e o Flow Courant Number, faz-se possível a adoção do número de interações e definição do tamanho do passo de tempo para a simulação. Por limitações de hardware, não foram simulados espaços de tempo da ordem microssegundos ou inferiores, dessa forma adotou-se o valor de $1,3 \times 10^{-5}$ s e 500 passos de tempo, totalizando 6,5 ms. A seleção desses valores para a escala de tempo se deu por limitações de hardware para espaços de tempo inferiores a esse, uma vez que foram conduzidas simulações para 10 casos distintos. Esse tempo total cobre a janela de interesse do fenômeno físico em estudo, capturando integralmente a evolução transiente relevante, além do fato de testes prematuros terem demonstrado boa compatibilidade para observação do fenômeno.

Para cada passo, empregaram-se 40 interações máximas. Essa escolha segue a diretriz do Fluent para formulações implícitas quando se busca um CFL efetivo baixo para robustez. O uso de 40 iterações por passo, combinada com critérios de resíduos de 10^{-6} (continuidade, momento, energia e espécies), mostrou-se suficiente para estabilizar os resíduos e fechar o balanço a cada avanço temporal, sem custo computacional proibitivo.

Em resumo, a junção do *Flow Courant Number*, do tamanho e do número de passos de tempo foram definidos para alinhar o avanço temporal à menor escala de malha/velocidade relevante no escoamento reativo, e cobrir todo o intervalo transiente onde se observam os picos de pressão e as mudanças morfológicas. Essa configuração está consistente com o papel do

Flow Courant Number e com o limite de iterações por passo para garantir convergência por passo sem recorrer a passos de tempo excessivamente pequenos.

3.4.5 Parâmetros iniciais

Por fim foram utilizados como parâmetros iniciais para a simulação os valores descritos na Tabela 3.6:

Tabela 3.6 – Propriedades iniciais

Propriedade	Grandeza		Referência
Massa Específica inicial (ρ_0)	0,85	kg/m ³	Vagner et al., 2012.
Velocidade de chama laminar (S_L)	2,272	m/s	Lu et al., 2022.
Temperatura inicial (T_0)	300	K	-
Pressão inicial (p_0)	1	atm	-
Razão de calores específicos (γ)	1,125		Lu et al., 2022.

No modulo de *Species Transport*, a mistura hidrogênio-ar foi configurada com propriedades dependentes da composição. Para a massa específica da mistura selecionou-se o método *compressible-volume-weighted*, já para a condutividade térmica e para a viscosidade, adotou-se *ideal-gas-mixing-law*.

O Fluent fornece opções de mistura para massa específica dependente da composição para tratar misturas compressíveis em que cada espécie pode seguir sua própria relação constitutiva (esse recurso foi incorporado a partir da versão 2021 R1). Esse método permite combinar espécies tratadas como gás ideal e espécies com propriedades de gás real em uma mesma mistura, mantendo a consistência da conservação de massa e da compressibilidade [ANSYS Inc., 2021].

No presente trabalho, a escolha *compressible-volume-weighted* garante coerência com a natureza compressível do escoamento reativo e compatibilidade com o tratamento de H₂ e ar como gases (ideal com variação térmica).

Já para propriedades de transporte em misturas gasosas, o ANSYS Fluent disponibiliza o *ideal-gas-mixing-law*, que é apropriado quando as espécies seguem o comportamento de gás

ideal e quando suas propriedades individuais dependem da temperatura seguindo os bancos do Fluent. Ao empregar *ideal-gas-mixing-law* para condutividade térmica da mistura, a viscosidade deve ser especificada por *ideal-gas-mixing-law*, assegurando compatibilidade numérica e física entre as duas propriedades de transporte [ANSYS Inc., 2021].

A massa específica *compressible-volume-weighted* mantém a conservação e a compressibilidade locais quando a fração de espécies varia no tempo e no espaço, sendo o método recomendado pelo Fluent para misturas compressíveis com espécies ideais e/ou reais na mesma simulação. A combinação de *ideal-gas-mixing-law* para as propriedades de transporte é indicada por ANSYS Inc., 2021, e é consistente com o regime gasoso ideal do sistema ar-hidrogênio tratado no presente estudo.

3.4.6 Tratamento e análise dos dados obtidos

O tratamento e a análise dos dados provenientes das simulações numéricas foram conduzidos de forma a possibilitar tanto a avaliação qualitativa quanto a análise quantitativa dos resultados a partir de dados experimentais sem a inclusão de obstáculos, para posteriormente serem incluídos nas simulações. Dessa forma, foi realizado um monitoramento das variáveis físicas de interesse, como pressão, temperatura, magnitude da velocidade e vorticidade.

O monitoramento das variáveis durante as simulações foi realizado por meio da ferramenta *Contours* (mapa de contorno) do ANSYS Fluent, definida para um plano bidimensional situado no centro da geometria do duto. Para análise visual, foram extraídas imagens para cada passo de tempo correspondentes ao mapa de contorno das variáveis de interesse utilizando-se a funcionalidade de Animação do Fluent.

A extração desses dados foi realizada em formato compatível com o software de pós-processamento ParaView. Por meio deste software, foi possível realizar uma filtragem dos dados e posteriormente uma extração da posição da frente de chama em função do tempo. Para a determinação da superfície de frente de chama adotou-se como a isosuperfície de temperatura igual a 1000 K. A partir da evolução temporal da posição da frente de chama, foi possível calcular a velocidade da frente de chama em diferentes instantes, permitindo a avaliação quantitativa do fenômeno. Assim, fez-se possível a comparação quantitativa dos resultados gerados com os dados experimentais oferecidos por Jiang et al., 2024.

A avaliação qualitativa baseou-se na análise das imagens obtidas dos mapas de contorno de temperatura, que permitem a identificação de formatos característicos da frente de chama. No caso da reação de hidrogênio com ar, a frente de chama apresenta geometrias específicas ao longo de sua propagação, como apresentado anteriormente.

Já a avaliação quantitativa foi conduzida a partir dos cálculos da velocidade da frente de chama obtidos. Os valores encontrados foram comparados com as medições experimentais de Jiang et al., 2024, garantindo a confiabilidade do modelo numérico. Dessa forma foram conduzidas mais simulações numéricas nas quais a razão de bloqueio e razão de equivalência foram variadas.

Foram extraídos mapas de contorno de temperatura, pressão, magnitude de velocidade e vorticidade. A partir desses contornos foram conduzidas análises a fim de identificar características morfológicas e a origem de instabilidades hidrodinâmicas. A velocidade máxima para caso simulado foi registrada assim como o tempo de trânsito. Esse tempo foi definido como o tempo decorrente a partir da ignição até que a frente de chama tocasse pela primeira vez a face a jusante. Essa métrica faz-se relevante pelo fato de que podem existir casos em que se tenha uma velocidade máxima maior ao longo do deslocamento da frente de chama, mas que seja reduzido de forma significativa, impactando o percurso total.

4 RESULTADOS

O presente capítulo apresenta e discute os resultados obtidos a partir das simulações numéricas realizadas no software ANSYS Fluent e seu pós-processamento pelo software ParaView. Inicialmente, foi realizada uma análise comparativa do modelo numérico para o caso de um duto sem obstáculos em relação a dados experimentais, utilizando como referência os resultados disponíveis no estudo de Jiang et al., 2024. A partir do modelo validado com dados experimentais, foram incluídos obstáculos na geometria e avaliados os impactos na velocidade de frente de chama. Os dados disponíveis de Jiang et al., 2024, foram convertidos para comportamentos de posição da frente de chama pelo tempo. Essa adaptação torna mais acessível a comparação direta dos dados. Além desses fatores, todos os dados gerados para o presente estudo foram obtidos por meio de simulações numéricas.

4.1 Análise comparativa do modelo

Para a obtenção do modelo numérico final, compatível com o comportamento da frente de chama tanto do ponto de vista qualitativo quanto quantitativo, foi necessário realizar uma série de testes exploratórios com diferentes parâmetros de simulação. Dentre esses, destacam-se as variações no tamanho inicial da esfera de ignição, na energia liberada por ela e no modelo de velocidade de chama inicial.

O estudo de referência de Jiang et al., 2024, adotou, em seus experimentos, uma energia de ignição de 1 mJ em um raio inicial de 0,004 m. No presente estudo, foram conduzidas simulações variando-se o raio inicial da esfera de ignição com o objetivo de avaliar sua influência na formação das superfícies morfológicas características da reação de hidrogênio e ar confinado. Observou-se que, para valores inferiores a 0,006 m, não ocorreu a formação completa dos formatos de frente de chama tipicamente relatados na literatura para este tipo de reação. Em particular, verificou-se que as formas *tulip flame* e *distorted tulip flame* somente se desenvolveram quando a ignição apresentou raio inicial igual ou superior a 0,006 m.

As variações dos modelos de velocidade de chama inicial, não apresentaram divergências significativas. Por esse motivo, foi adotado o modelo de *Turbulent Length*, pelo fato desse modelo exigir menor custo computacional.

Outro fator variado foi a posição da ignição, na qual foram exploradas as posições do centro da circunferência, localizado de acordo com as coordenadas de Jiang et al., 2024, e outra posicionada no centro de uma das faces do duto. Não foram obtidas as morfologias esperadas quando a ignição foi inserida na face, indicando não ser uma opção viável.

Esses resultados indicam que, para a malha empregada neste estudo, a formação dessas morfologias requer um volume inicial de ignição suficientemente grande para permitir a evolução das instabilidades e interações entre o escoamento e as reações químicas que caracterizam esses formatos. Por outro lado, formatos como a chama plana não foram observados, independente do teste realizado, o que sugere que sua formação demanda malhas de maior refinamento espacial, capazes de capturar gradientes mais sutis na região da frente de chama.

Além da variação do tamanho da esfera de ignição, foram avaliadas modificações nos parâmetros da equação simplificada do mecanismo de um passo empregada para a taxa de reação, descrita pela forma modificada da equação de Arrhenius. Alterações nos fatores pré-exponencial, expoente de temperatura e energia de ativação foram implementadas, buscando favorecer a reprodução das morfologias características. Constatou-se que essas modificações testadas não foram suficientes para induzir a formação dos formatos de chama desejados, reforçando a predominância do tamanho da ignição como parâmetro determinante para a reprodução fiel das estruturas observadas experimentalmente, para o mecanismo cinético simplificado proposto de 1 passo.

A Figura 4.1 apresenta a comparação qualitativa entre a evolução da frente de chama obtida experimentalmente por Jiang et al., 2024, (coluna à esquerda) e os resultados numéricos do presente estudo (coluna à direita) para diferentes instantes de tempo. As imagens numéricas representam os mapas de contorno de temperatura no plano de centro do duto. A fim de tornar os resultados compatíveis com os dados experimentais, introduzido um atraso na ignição de 0,8 ms. Para os dados gerados as temperaturas máximas obtidas foram equivalentes a 2800 K em todas as simulações efetuadas.

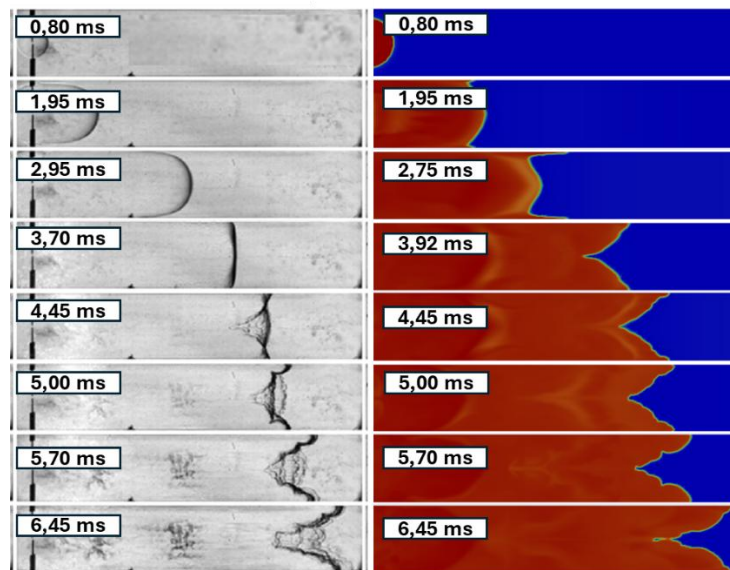


Figura 4.1 – Comparativo dos resultados experimentais obtidos por Jiang et al., 2024, e os resultados do contorno de temperatura para a presente pesquisa.

Observa-se a concordância entre os padrões morfológicos da frente de chama obtidos nas simulações e aqueles obtidos experimentalmente ao longo da evolução temporal. Em ambos os casos, o desenvolvimento inicial (a partir de 0,8 ms) é marcado pela formação da chama esférica, seguida pela transição para a chama em forma de dedo (*finger flame*), impulsionado pela expansão térmica e pela aceleração axial dos gases queimados (aproximadamente entre 1,95 e 2,95 ms).

Um fator de relevância, ainda presente nos instantes iniciais (a partir de 3,7 ms), é a notória diferença de morfologia entre os dados experimentais e os resultados da simulação numérica. Enquanto os dados obtidos por imagens Schlieren para o instante de 3,7 ms apresentaram uma chama planar, a simulação já constava com uma chama em forma de tulipa desenvolvida de forma prematura. Essa observação, está correlacionada com o aumento da esfera de ignição, que por ser maior na simulação ocasionou uma morfologia antecipada. Apesar dessa constatação, a chama plana não foi observada, ressaltando a necessidade de refinamento superior para reprodução desse formato. Outro fator de possível influência na formação da chama plana se deve ao fato de o passo de tempo utilizado não possuir o tamanho adequado para capturar o fenômeno. Não foram utilizados valores menores de CFL em função das limitações de hardware, sendo esse um fator a ser aprimorado em trabalhos futuros.

Nos instantes intermediários (3,92–4,45 ms), verifica-se o surgimento da morfologia do tipo chama em forma de tulipa em ambos os casos, caracterizada pela inversão da curvatura da frente de chama em relação à direção de propagação. Essa inversão ocorre em função da interação da frente com as ondas de pressão refletidas pelas paredes e com gradientes de velocidade induzidos pelo confinamento.

Em tempos mais avançados (5,0–5,7 ms), tanto nos resultados numéricos quanto nos experimentais, apresentaram a transição para uma chama em forma de tulipa distorcida, na qual observa-se distorções na frente devido à intensificação das instabilidades hidrodinâmicas. Entre os mecanismos responsáveis por essa distorção, destaca-se a instabilidade de Kelvin–Helmholtz, que amplificam perturbações na interface chama–mistura não queimada.

Embora o comportamento global apresente elevada similaridade, algumas discrepâncias sutis podem ser notadas. Os instantes de ocorrência das transições morfológicas mostram pequenas diferenças entre o experimento e a simulação, o que pode ser atribuído à sensibilidade do fenômeno a parâmetros como energia de ignição, refinamento de malha e modelo cinético empregado. Ainda assim, a proximidade na evolução espacial da frente de chama confirma a capacidade do modelo em reproduzir fielmente os regimes de propagação observados no estudo de referência.

A fim de aprofundar a análise qualitativa, foi investigado o comportamento da frente de chama nas regiões próximas às paredes do duto, possibilitando identificar possíveis diferenças morfológicas em relação ao plano central. A Figura 4.2 apresenta o mapa de contorno de temperatura nas paredes laterais para os mesmos instantes de tempo em que, no plano médio, foi identificada a formação da chama em forma de tulipa.

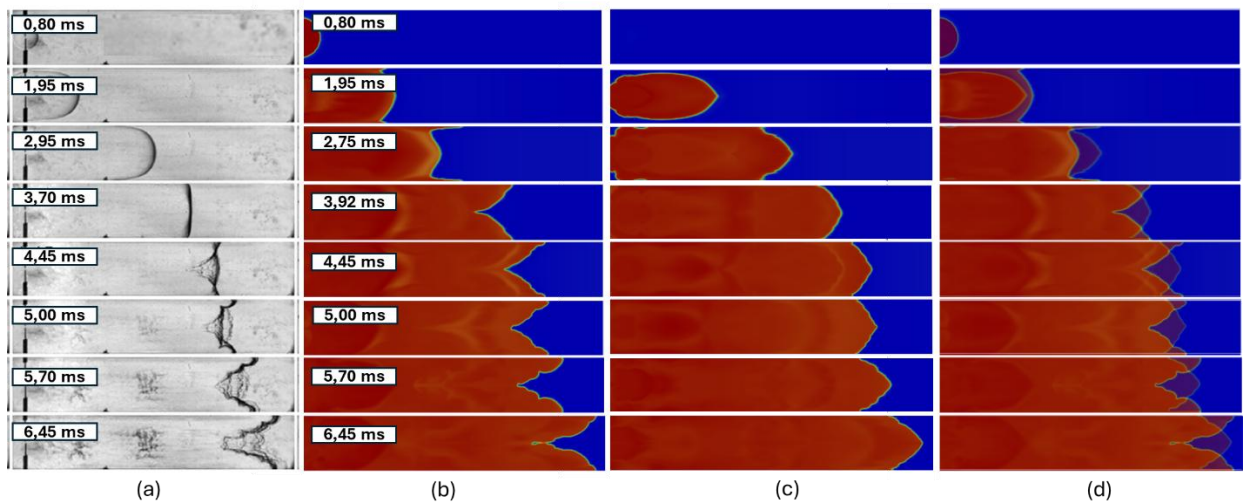


Figura 4.2 – Comparação dos dados experimentais e resultados numéricos no plano de centro e o plano das paredes. (a) representa os dados experimentais gerados por Jiang et al., 2024. (b) o contorno de temperatura da simulação no plano de centro. (c) o contorno de temperatura na parede. (d) a sobreposição dos contornos de temperatura gerados pelo modelo numérico.

A partir dos dados gerados foi possível observar que, nos instantes correspondentes à presença da chama em forma de tulipa no plano central, as paredes exibem uma frente de chama com formato curvo, característico da morfologia denominada saia de chama tocando a parede. Essa configuração é marcada pela proximidade da periferia da frente de chama com as paredes, gerando uma interface convexa em relação ao escoamento.

A relevância dessa constatação torna-se evidente quando se consideram as observações experimentais de Jiang et al., 2024. Por se tratar de um duto com paredes translúcidas, as imagens Schlieren obtidas no estudo experimental registram, de forma integrada, tanto o formato da frente de chama no plano central quanto o das regiões junto às paredes. Esse efeito de sobreposição faz com que a visualização experimental apresente simultaneamente a geometria típica da chama em forma de tulipa (plano central) e o contorno arredondado da saia de chama tocando a parede (próximo às paredes).

A comparação direta entre os contornos obtidos nas simulações do presente estudo e as imagens experimentais confirma a coerência dessa interpretação de que quando analisados em conjunto (plano central e plano das paredes) tem-se os formatos observados apresentando o mesmo padrão de sobreposição reportado no experimento. Essa correspondência reforça a validade do modelo numérico empregado, demonstrando que a simulação é capaz de capturar não apenas o comportamento médio da frente de chama, mas também variações morfológicas

tridimensionais relevantes para a compreensão global do fenômeno. Por se tratar de um problema de elevada complexidade e comportamento tridimensional, assim como constatado por Emami et al., 2015, as simulações numéricas realizadas em três dimensões capturam melhor as especificidades do comportamento da chama, sendo esse um diferencial da presente pesquisa.

A Figura 4.3 apresenta a comparação quantitativa da posição da frente de chama em função do tempo para os dados experimentais de Jiang et al., 2024, e para o modelo numérico implementado neste trabalho, utilizando malha com aproximadamente 1 milhão de elementos (refinamento médio equivalente a 0,74 mm). Para os dados numéricos, foi aplicado um atraso de 0,8 ms na ignição. Por conta do aumento no tamanho da esfera de ignição, o deslocamento da frente de chama foi contabilizado considerando essa variação.

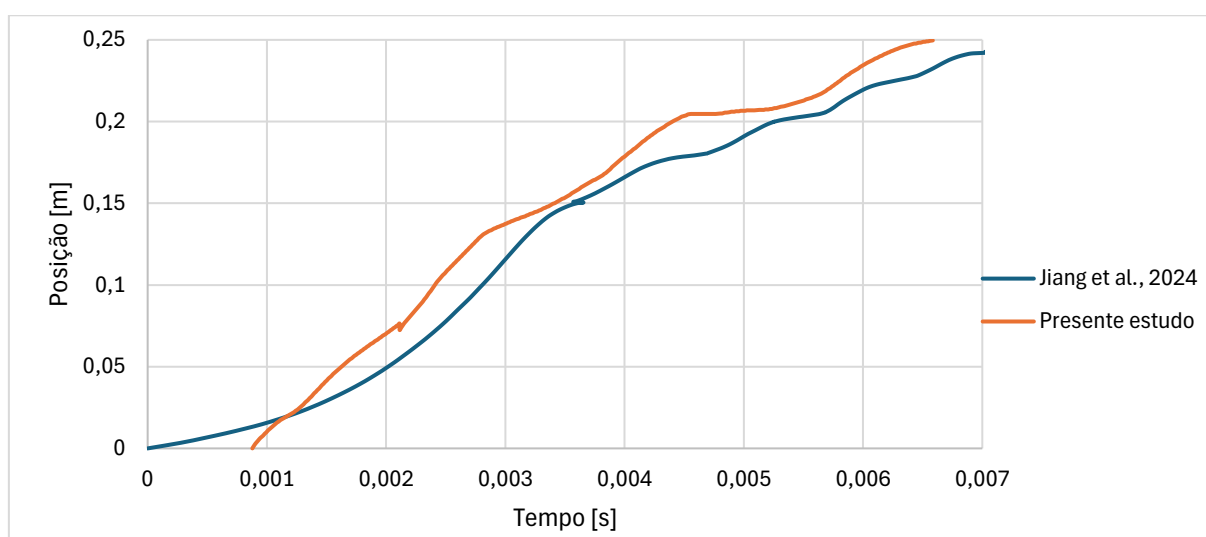


Figura 4.3 – Comparação da posição da frente de chama em função do tempo entre dados experimentais de Jiang et al., 2024, e resultados numéricos obtidos no presente estudo com malha de 1 milhão de elementos.

No início do deslocamento, existe uma divergência mais acentuada entre as duas curvas, com os dados experimentais seguindo um comportamento parabólico, enquanto os dados numéricos adotam outro comportamento. Essa discrepância inicial pode ser atribuída à menor capacidade da malha empregada em capturar com precisão os fenômenos que ocorrem na fase primária da propagação da chama, especialmente no que diz respeito à formação de morfologias de transição, como a chama plana. Essa morfologia não foi observada no presente estudo, indicando que, para a malha utilizada, seria necessário um refinamento espacial mais elevado

para reproduzir esse formato. Além do refinamento, alterações no valor do passo de tempo, e por consequência o valor do CFL, devem ser exploradas. Menores tamanhos de malha e menores valores de CFL se tornam indisponíveis para o presente estudo pelo limitante de hardware.

Por outro lado, morfologias como *tulip flame* e *distorted tulip flame* foram formadas de maneira consistente, mesmo com o refinamento atual, desde que associadas a um raio inicial de ignição igual ou superior a 0,006 m. Esse comportamento reforça que tais formatos não dependem de um refinamento tão elevado para serem corretamente capturados. Já as morfologias iniciais da combustão e a chama plana demonstram maior sensibilidade tanto ao refinamento quanto ao tamanho inicial da ignição, sugerindo que a diferença observada no início do deslocamento é reflexo dessa limitação.

À medida que a chama evolui no tempo, o afastamento entre as curvas diminui, se tornando quantitativamente menor, resultando em uma maior concordância no trecho final do deslocamento. Isso indica que, para estágios mais avançados da combustão, o modelo numérico reproduz de forma adequada a velocidade de propagação da frente de chama, validando sua aplicabilidade para a sequência de análises apresentadas nos tópicos seguintes.

Além da avaliação quantitativa da posição pelo tempo da frente de chama, um comparativo da pressão também foi realizado. A Figura 4.4 apresenta a evolução temporal da pressão registrada no ponto fixo localizado na extremidade final do duto, nas coordenadas (0,047; 0,025; 0,000 m), comparando os resultados numéricos do presente estudo com os dados experimentais de Jiang et al., 2024.

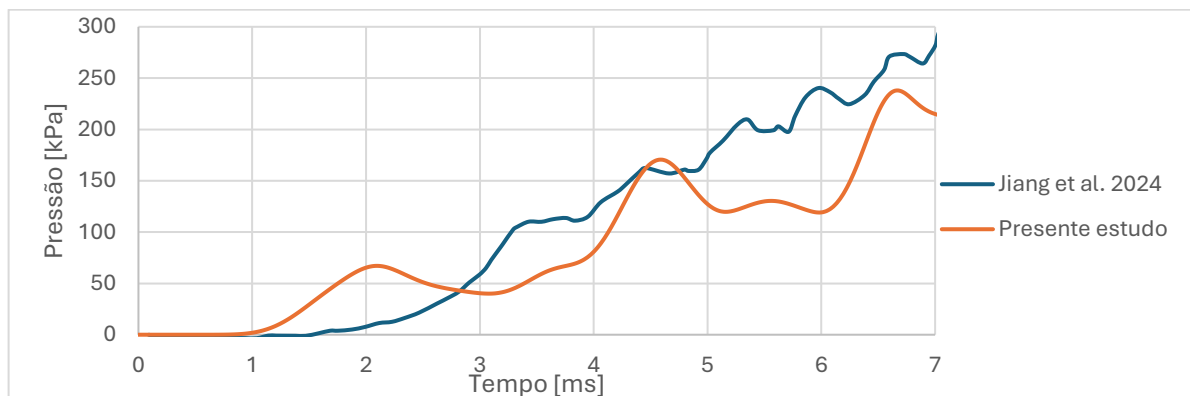


Figura 4.4 – Comparação da pressão em função do tempo entre dados experimentais de Jiang et al., 2024, e resultados numéricos obtidos no presente estudo para o ponto fixo localizado na extremidade final do duto (0,047; 0,025; 0,000).

Observa-se que o perfil de crescimento da pressão apresenta um crescimento médio compatível entre os dois conjuntos de dados, com a ocorrência de múltiplos picos sucessivos apresentando um crescimento médio similar. Para o tempo de 7 ms a diferença entre os valores dos picos de pressão foi de 57 kPa, sendo considerada suficiente para o seguimento da pesquisa. A sequência de aumentos graduais seguida por incrementos mais abruptos está relacionada à intensificação da combustão turbulenta e à formação de instabilidades hidrodinâmicas que contribuem para a compressão local do escoamento.

Nos instantes iniciais, a simulação prevê um aumento de pressão mais precoce em relação ao experimento, o que está alinhado com a divergência inicial já discutida na análise da posição da frente de chama (Figura 4.3). Essa antecipação no crescimento da pressão reforça a interpretação de que, na fase inicial da combustão, o refinamento temporal e espacial da malha não foi suficiente para capturar integralmente a transição de formatos morfológicos, influenciando a predição da evolução da pressão.

Nos instantes intermediários (4,0–5,0 ms), as curvas apresentam convergência mais próxima, com sobreposição parcial dos picos de pressão, o que indica que, a partir desse estágio, a dinâmica de propagação da chama foi reproduzida de maneira adequada pelo modelo. Na fase final (após 6,0 ms), embora as magnitudes de pico previstas numericamente sejam ligeiramente inferiores às experimentais, a tendência de crescimento e a frequência relativa das oscilações são preservadas, validando o modelo para a análise dos regimes de propagação em estágios mais avançados.

A fim de identificar a qualificação do refinamento de malha empregado, uma validação foi realizada. A validação contou com a variação das dimensões dos elementos utilizados, que por consequência variam o número de elementos totais da malha. Os tamanhos de elementos simulados foram equivalentes a 0,74mm, 0,92mm e 1,17 mm. Essas dimensões de elementos produziram 1 milhão, 500 mil e 250 mil elementos respectivamente. A Figura 4.5 apresenta a análise de sensibilidade de malha para a posição da frente de chama em função do tempo, considerando três níveis de refinamento e comparando-os com os dados experimentais de Jiang et al., 2024.

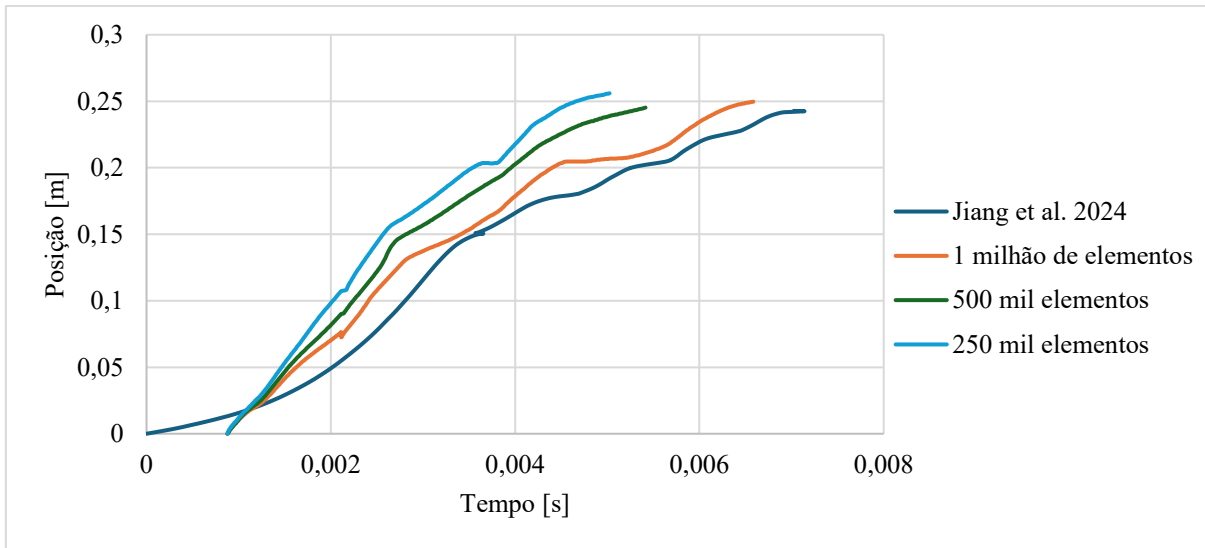


Figura 4.5 – Comparação da posição da frente de chama em função do tempo para diferentes refinamentos de malha (250 mil, 500 mil e 1 milhão de elementos) e dados experimentais de Jiang et al., 2024.

Observa-se que o aumento do refinamento resulta em maior aproximação dos resultados numéricos com os dados experimentais. A malha mais grosseira (250 mil elementos) apresentou maior discrepância no início da propagação, subestimando a velocidade da frente de chama na fase inicial. Essa diferença é consequência direta da menor capacidade de resolução dos gradientes acentuados de temperatura e velocidade que caracterizam a combustão laminar inicial, dificultando a correta previsão das morfologias primárias da frente de chama.

A malha intermediária (500 mil elementos) mostrou desempenho significativamente melhor, reduzindo a diferença inicial em relação aos dados experimentais e mantendo boa concordância no trecho intermediário do deslocamento. Já a malha de 1 milhão de elementos apresentou o melhor alinhamento com o experimento. A utilização de elementos de tamanho inferior a 1mm é sustentada pelo sucesso alcançado em simular o fenômeno feitos por Jiang et al., 2024, e Mei et al., 2023, que fizeram uso de elementos de malha de 1mm.

Apesar do maior refinamento empregado, permanece uma divergência inicial semelhante à já discutida. Essa constatação reforça que, para capturar plenamente a formação da chama plana e transições morfológicas iniciais, seria necessário um refinamento superior ao utilizado, especialmente na região de ignição. Considerando o custo computacional associado, a malha de 1 milhão de elementos foi adotada como base para as simulações subsequentes por oferecer a melhor compatibilidade.

Além das divergências quantitativas para cada refinamento de malha empregado, foram observadas divergências qualitativas em relação aos formatos característicos da frente de chama. Na Figura 4.6 são apresentadas as morfologias do mapa de contorno de temperatura para cada refinamento.

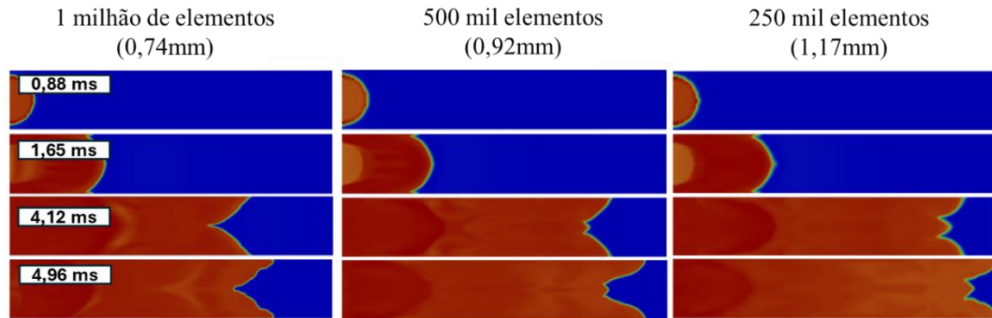


Figura 4.6 – Comparativo do contorno de temperatura para cada refinamento de malha empregado para um mesmo instante de tempo.

A partir da comparação morfológica dos mapas de contorno de temperatura, se faz evidente a necessidade de um refinamento mínimo a fim de capturar com precisão formatos característicos. Faz-se perceptível que as demais malhas testadas, não capturaram com a mesma precisão a morfologia de tulipa, apresentando formatos mais distorcidos conforme a quantidade de elementos cai. Dessa forma foi estabelecido a malha de 1 milhão de elementos como parâmetro mínimo a fim de capturar as morfologias desejadas. Malhas mais refinadas não foram utilizadas pelo limitante de hardware. Além das divergências morfológicas, torna-se perceptível a superestimação do avanço da frente de chama para um mesmo instante de tempo (especialmente para a malha de 250 mil elementos).

Além da validação da malha de forma qualitativa e quantitativa do formato da frente de chama e a posição dela respectivamente, foi feito um comparativo da pressão de forma quantitativa. Assim, a Figura 4.7 apresenta a comparação entre os perfis de pressão obtidos numericamente para três refinamentos de malha (250 mil, 500 mil e 1 milhão de elementos) e os dados experimentais de Jiang et al., 2024, considerando a medição no ponto fixo localizado na extremidade final do duto.

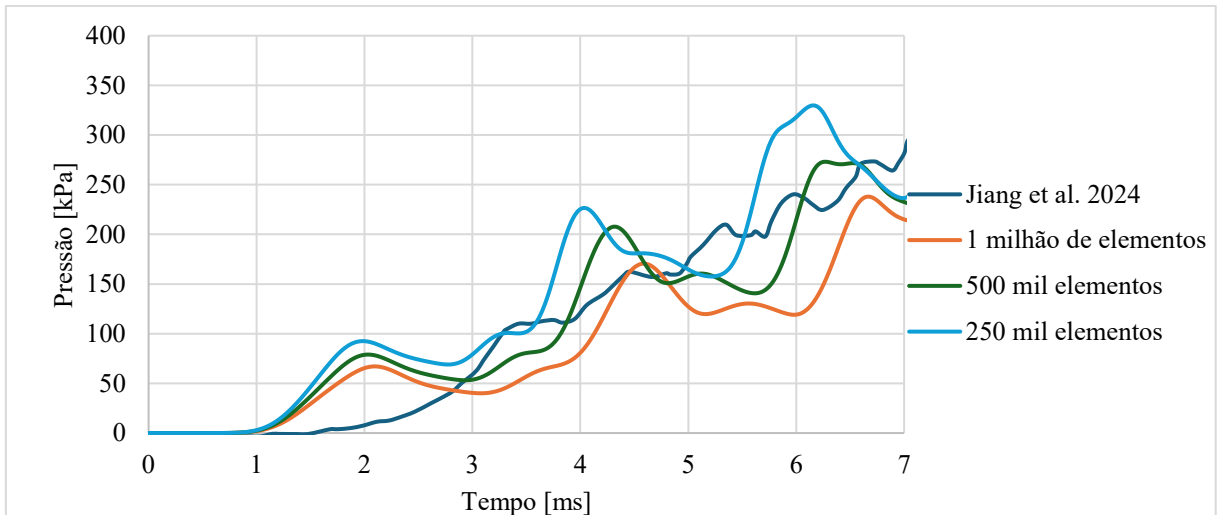


Figura 4.7 – Análise de sensibilidade de malha para a pressão em função do tempo no ponto fixo localizado na extremidade final do duto (0,376; 0,025; 0,000), comparando diferentes refinamentos (250 mil, 500 mil e 1 milhão de elementos) e dados experimentais de Jiang et al., 2024.

Observa-se que a malha mais grosseira (250 mil elementos) apresentou menor precisão na predição das magnitudes de pico e na reprodução das oscilações observadas nos dados experimentais. Apesar de capturar a tendência geral de crescimento da pressão, essa configuração subestima valores em momentos-chave e apresenta defasagens temporais na ocorrência de máximos e mínimos locais.

A malha intermediária (500 mil elementos) apresentou melhora significativa, com maior proximidade na previsão das amplitudes e fases das oscilações. No entanto, algumas diferenças ainda são perceptíveis, especialmente em picos de pressão mais pronunciados, como aqueles observados próximos a 4 ms e 6 ms.

O refinamento mais alto (1 milhão de elementos) apresentou maior consistência na reprodução das tendências experimentais, embora ainda subestime os picos máximos de pressão. Essa subestimação está relacionada à mesma limitação discutida anteriormente, que pode influenciar as ondas de pressão.

De modo geral, verifica-se que o aumento no número de elementos melhora a precisão da simulação, especialmente na previsão da sequência e intensidade dos eventos de aumento de pressão. A malha de 1 milhão de elementos foi escolhida como base para as análises subsequentes por proporcionar um bom compromisso entre qualidade de resultados.

4.2 Resultados obtidos para as simulações com obstáculos de diferentes BR

A partir de um modelo numérico validado quantitativamente e qualitativamente em relação a dados experimentais, se faz possível o início das simulações com geometrias que apresentam obstáculos no duto. Primariamente foi efetuada uma simulação com a razão de bloqueio equivalente a 0,5 e uma razão de equivalência igual a 1,0. Os resultados da simulação em comparação com dados experimentais estão apresentados a seguir.

A Figura 4.8 exhibe, lado a lado, a evolução temporal da frente de chama ao interagir com um obstáculo único, permitindo uma leitura direta dos mecanismos de aceleração induzidos pela obstrução e a coerência morfológica entre o modelo numérico e o experimento.

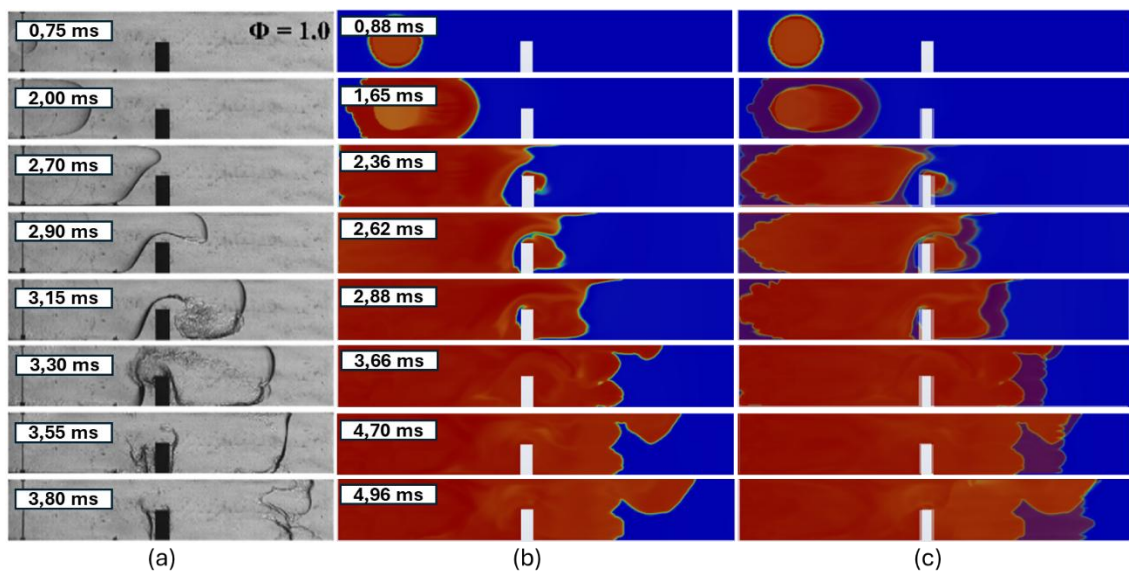


Figura 4.8 – Comparação qualitativa entre os dados experimentais em (a) e a simulação com obstáculo de BR igual a 0,5 para $\Phi = 1,0$ em (b). Os resultados da simulação foram sobrepostos entre o plano central e plano da parede em (c).

Os instantes indicados nas faixas (0,75–2,9 ms; 2,9–3,1 ms; 3,1–3,7 ms; 3,7–5,0 ms) cobrem desde a aproximação da chama ao obstáculo até a fase logo após a sua superação. A concordância de padrões é dada por um crescimento hemisférico inicial, seguido de um alongamento tipo chama em formato de dedo, e depois, uma deformação e curvatura, culminando em um enrugamento e suas distorções, agora moduladas pela presença do

obstáculo. A fim de tornar a análise específica e localizada por faixas de tempo, a mesma foi segmentada e suas divisões são descritas a seguir.

(1) Aproximação e escoamento afunilado junto ao obstáculo

Nos primeiros instantes (0,75–2,9 ms), a frente de chama aproxima-se do obstáculo e o escoamento dos produtos, impulsionados pela expansão térmica, é forçado a contornar a barreira por canais laterais com seção reduzida. O gradiente de velocidade elevado nesses “gargalos” gera camadas de cisalhamento ao longo das superfícies do obstáculo e das paredes adjacentes, predispondo a formação de instabilidade de KH. A presença de um salto de velocidade entre jatos laterais e regiões mais lentas a jusante amplia a taxa de crescimento de KH que, por sua vez, aumentam a taxa de estiramento da frente de chama e a sua área interfacial reativa.

(2) Zona de recirculação a jusante e aprisionamento de reagentes

Logo após o contato com a borda do obstáculo (2,9–3,1 ms), observa-se a formação de bolsões de recirculação. Esses vórtices aprisionam a mistura não queimada, que é então misturada pelos produtos queimados, favorecendo ignições locais por difusão e encurtando tempos de indução efetivos. Essa morfologia do escoamento produz enrugamento persistente da frente e aceleração local, coerentes com as estruturas realçadas nas imagens Schlieren.

(3) Inversão de curvatura sob ação de ondas de compressão/reflexão

Na janela 3,1–3,7 ms, tanto no experimento quanto na simulação torna-se evidente o enrugamento da frente e a ampliação da turbulência. Em dutos confinados, a origem clássica da tulipa está associada à passagem e reflexão de ondas de pressão que reordenam o campo de aceleração do escoamento. Já com o obstáculo, esse efeito é amplificado por reflexões nas quinas e pelo choque entre jatos laterais e a região central a jusante.

(4) Papel das instabilidades

A evolução posterior (3,7–5,0 ms) exhibe distorções adicionais, compatíveis com a ação combinada de instabilidades:

Rayleigh–Taylor: a interface dos reagentes não queimados e produtos é acelerada no sentido de os produtos empurrarem os reagentes. Sempre que há aceleração efetiva normal à frente de chama, a taxa de crescimento de ondulações, por conta da instabilidade RT, favorece com que a chama penetre nos reagentes.

Richtmyer–Meshkov: compressões transitórias (ondas de pressão ou choques fracos) que cruzam a interface chama–reagente induzem vorticidade baroclínica. O termo de produção de vorticidade atua fortemente na frente e nas bordas do obstáculo, gerando vórtices adicionais e intensificando o enrugamento. Essa produção baroclínica explica o incremento súbito da curvatura e a assimetria observada após a passagem pelo obstáculo.

Kelvin–Helmholtz: permanece ativo nas camadas de cisalhamento das passagens laterais e na esteira do obstáculo. Os vórtices de KH promovem uma mistura turbulenta e aumento sustentado da taxa de liberação de calor.

A atuação conjunta de RT (aceleração interfacial), RM (impulsos de pressão/choque) e KH (cisalhamento) forma um ciclo de realimentação e jatos induzidos pelo obstáculo deformam a frente. Esses fatores fazem com que a frente enrugada aumenta a liberação de calor e tenha um acréscimo de calor que acelera os jatos, intensificando novamente as instabilidades. Esse ciclo explica a rápida transição para elevados enrugamentos e distorções da superfície da frente de chama.

(5) Convergências e pequenas defasagens temporais

A correspondência morfológica entre simulação e experimento é nítida ao longo de toda a sequência. Pequenas defasagens de tempo entre marcos visuais são esperadas e decorrem da diferença de raio e energia de ignição adotadas (neste estudo, raio equivalente a 0,006 m para reproduzir as morfologias), assim como houve nos casos sem BR no qual houve uma formação de chama em forma de tulipa de forma prematura. Além desse fator, a análise qualitativa única e exclusiva do plano de centro pode mascarar os resultados parecendo inicialmente que existem divergências morfológicas maiores que o esperado. Quando esse plano é observado adjunto ao

plano da parede, se faz notório uma melhor compatibilidade dos formatos da frente de chama, ressaltando a importância de simulações tridimensionais.

Algumas divergências foram observadas em relação a subestimação do avanço da frente de chama em relação aos dados experimentais. O refinamento de malha no entorno do obstáculo e a sensibilidade à cinética utilizada podem ser a fonte geratriz dessas divergências. Os mesmos eventos topológicos (envolvimento da parede, formação da esteira, inversão de curvatura e distorção subsequente) aparecem em ambos os casos, suportando a validade do modelo para investigar a influência de barreiras na aceleração da chama.

(6) Implicações para aceleração e DDT

Embora o regime aqui ilustrado permaneça na categoria de deflagração, os mecanismos identificados (jatos laterais acelerados, recirculação, produção baroclínica de vorticidade e crescimento de instabilidades) são precisamente aqueles associados à elevação progressiva da velocidade de frente de chama e ao encurtamento do tempo da transição de deflagração para detonação (DDT) em geometrias com obstáculos. Caso houvesse mais obstáculos a velocidade de frente de chama aumentaria podendo chegar a uma DDT.

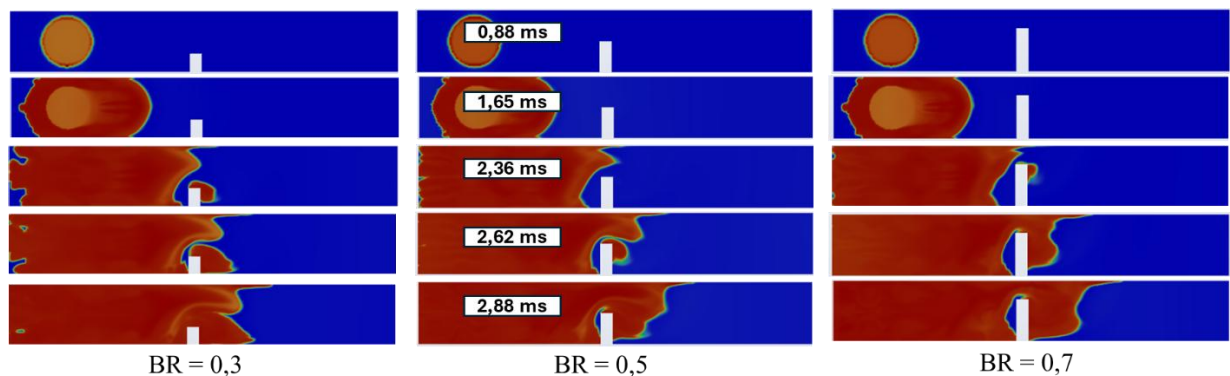


Figura 4.9 – Comparação dos mapas de contorno de temperatura no plano médio para três razões de bloqueio: BR = 0,3; 0,5; e 0,7 ($\Phi = 1,0$), nos mesmos instantes.

A Figura 4.9 evidencia que o aumento da razão de bloqueio altera de modo sistemático a morfologia da frente de chama quando esta interage com o obstáculo:

- Estágio de aproximação (0,88–1,65 ms): Em todos os casos observa-se a evolução hemisférica inicial e o alongamento tipo *finger shape flame*. Contudo, nessa fase o

escoamento não apresenta alterações significativas em relação a morfologia, fator esse que fica evidente pela análise quantitativa;

- Contato e contorno da barreira (2,36–2,62 ms): Para $BR = 0,7$ nota-se uma deflexão mais acentuada dos jatos laterais que contornam a barreira, com zonas de recirculação a jusante mais aceleradas e instáveis. Esses bolsões aprisionam reagente de menor temperatura e promovem ignições locais por difusão, acelerando o consumo e ampliando a área interfacial reativa. Em $BR = 0,5$, o padrão é semelhante, porém com uma recirculação mais lenta. E em $BR = 0,3$, a frente é menos deformada e a recirculação é mais suave.
- Pós-passagem (2,88 ms): A jusante do obstáculo, $BR = 0,7$ exhibe frente mais enrugada e assimétrica, compatível com a ação combinada de KH nas camadas de cisalhamento e RM devido a pulsos de pressão/reflexões nas quinas do obstáculo. Em paralelo, a aceleração efetiva da interface (produtos de elevada temperatura “empurrando” os reagentes) favorece Rayleigh–Taylor (RT), cujo crescimento é maior quanto mais intensas forem as acelerações locais, condição mais frequente nos casos de maior BR.

Em resumo, quanto maior o BR, tem-se jatos laterais mais rápidos que, por consequência, geram cisalhamento e recirculações mais intensas. Com essas intensificações há um maior enrugamento e maior liberação de calor com ondas de compressão/reflexão mais fortes. Esse ciclo de realimentação explica a antecipação das morfologias de alta curvatura e o ganho de velocidade observado adiante.

A fim de determinar melhor os efeitos das variações na posição da frente de chama e suas respectivas velocidades, os dados quantitativos foram comparados. A Figura 4.10 apresenta o comportamento da posição da frente de chama pelo tempo para diferentes razões de bloqueio. A diferença de velocidade pode ser observada pela variação na inclinação das curvas. Foi incluído no gráfico, em vermelho, a posição do obstáculo com o intuito de tornar visual a alteração de comportamento a partir do ponto que a frente de chama interage com ele.

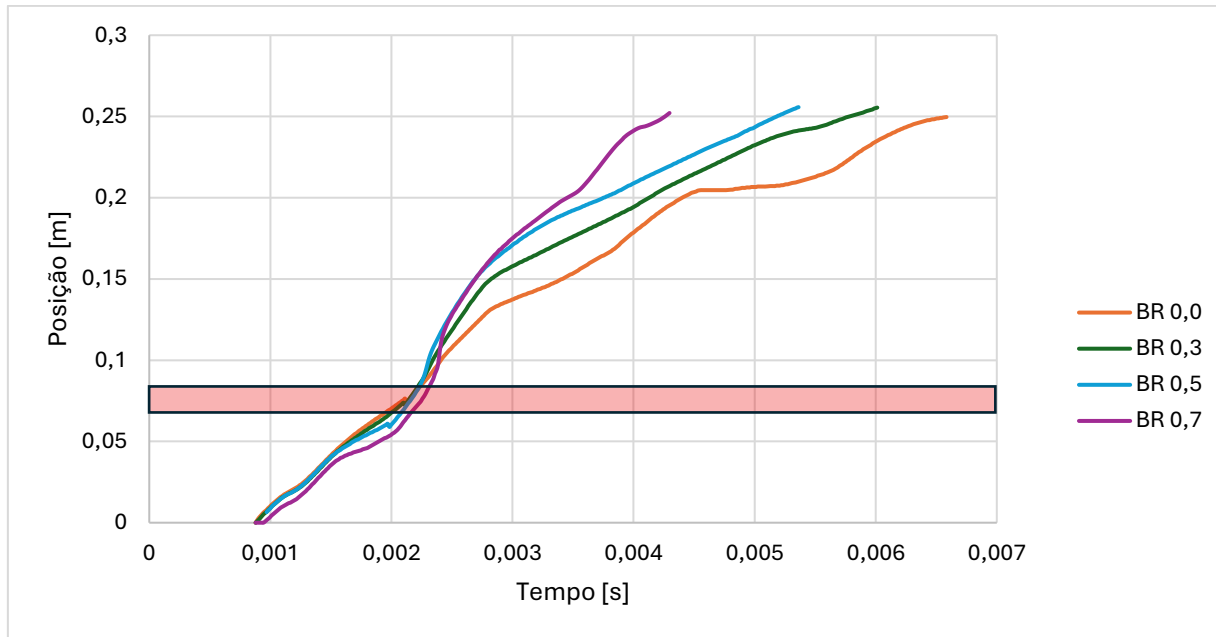


Figura 4.10 – Posição da frente de chama ao longo do tempo para BR = 0,0 (sem obstáculo), 0,3; 0,5; e 0,7 ($\Phi = 1,0$).

A Figura 4.10 traduz a leitura morfológica em termos quantitativos. As inclinações das curvas representam a velocidade instantânea da frente de chama e deixam claro os seguintes fatores:

1. **Ordenamento por BR:** a partir da posição onde encontra-se o obstáculo, estabelece-se a hierarquia $BR\ 0,7 > BR\ 0,5 > BR\ 0,3 >$ sem obstáculo em termos de deslocamento, refletindo diretamente o incremento de turbulência e compressões transitórias induzidas pela obstrução;
2. **Trechos de reaceleração:** pequenas mudanças de inclinação (reacelerações) ocorrem quando a frente contorna a barreira e entra na esteira a jusante. Esses trechos são mais marcados para $BR = 0,7$, coerentes com a intensificação de KH e RM discutida anteriormente;
3. **Perfil após o contato com o obstáculo:** as divergências no perfil de posição pelo tempo após o contato com o obstáculo, assim como as inclinações das curvas, traduzem-se na variação de velocidade;

4. Apesar de qualitativamente as divergências de descolamento não se fazerem tão perceptíveis, na forma gráfica se torna notório a maior velocidade para maiores razões de bloqueio.

Do ponto de vista de mecanismos, a maior obstrução efetiva reduz a área livre transversal, elevando as velocidades locais dos jatos. Isso amplifica cisalhamento e gradientes de pressão, alimentando o trio de instabilidades, que por sua vez aumentam a área de chama e a taxa de liberação de calor. O acoplamento resultante acelera a frente de chama, exatamente como capturado pelo aumento da inclinação das curvas com a BR.

A comparação dos valores obtidos para a pressão para as diferentes razões de bloqueio é apresentada na Figura 4.11.

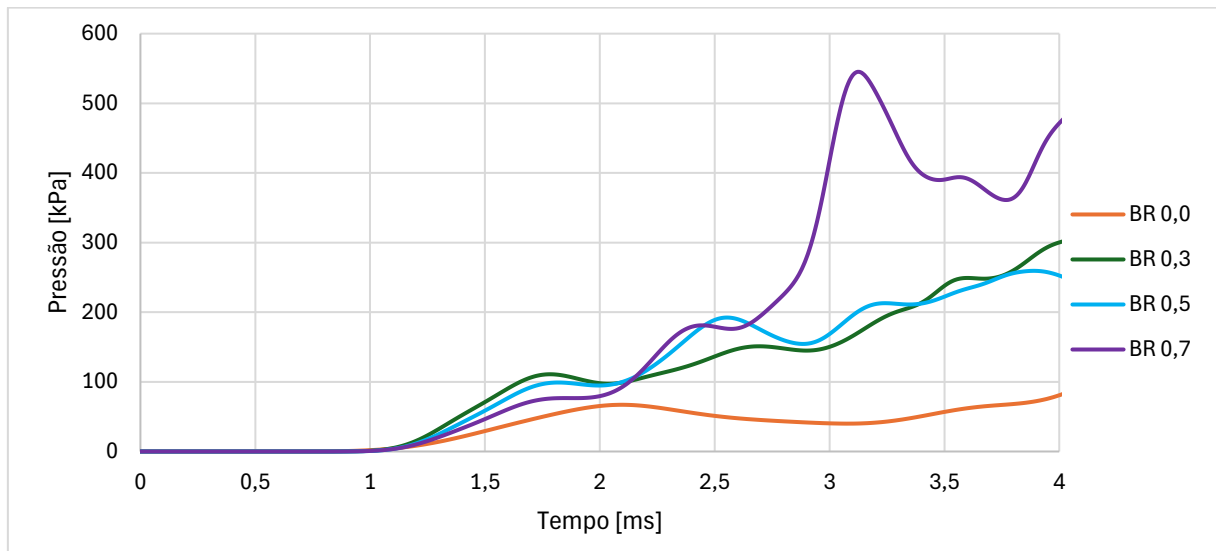


Figura 4.11 – Evolução temporal da pressão no ponto (0; 0,25; 0,376) para $\Phi = 1,0$, comparando BR = 0,3; 0,5; 0,7 e referência Jiang et al., 2024, sem obstáculos.

A análise demonstra que o aumento da razão de bloqueio influencia significativamente a amplificação de pressão, especialmente para BR = 0,7, que apresenta um pico acentuado em aproximadamente 3,2 ms, atingindo valores próximos de 550 kPa, seguido de queda e oscilações características de reflexões e interações de ondas de pressão. O BR = 0,3 apresenta crescimento mais gradual, alcançando o maior pico (300 kPa) no final do intervalo. O BR = 0,5 exibe comportamento intermediário, com múltiplos picos e patamar final em torno de 260 kPa.

O valor máximo de pressão observado nos testes experimentais conduzidos por Jiang et al., 2024, foi próximo de 120 kPa, menos da metade do registrado para BR = 0,3 e

consideravelmente inferior aos casos de $BR = 0,5$ e $BR = 0,7$. Esses resultados confirmam que o aumento da BR intensifica a interação entre a frente de chama e as ondas de pressão geradas, favorecendo mais a aceleração e compressão do escoamento reativo.

A Figura 4.12 apresenta a evolução da velocidade ao longo do duto para diferentes razões de bloqueio, permitindo uma avaliação detalhada do impacto geométrico na intensificação do escoamento e no processo de aceleração da chama.

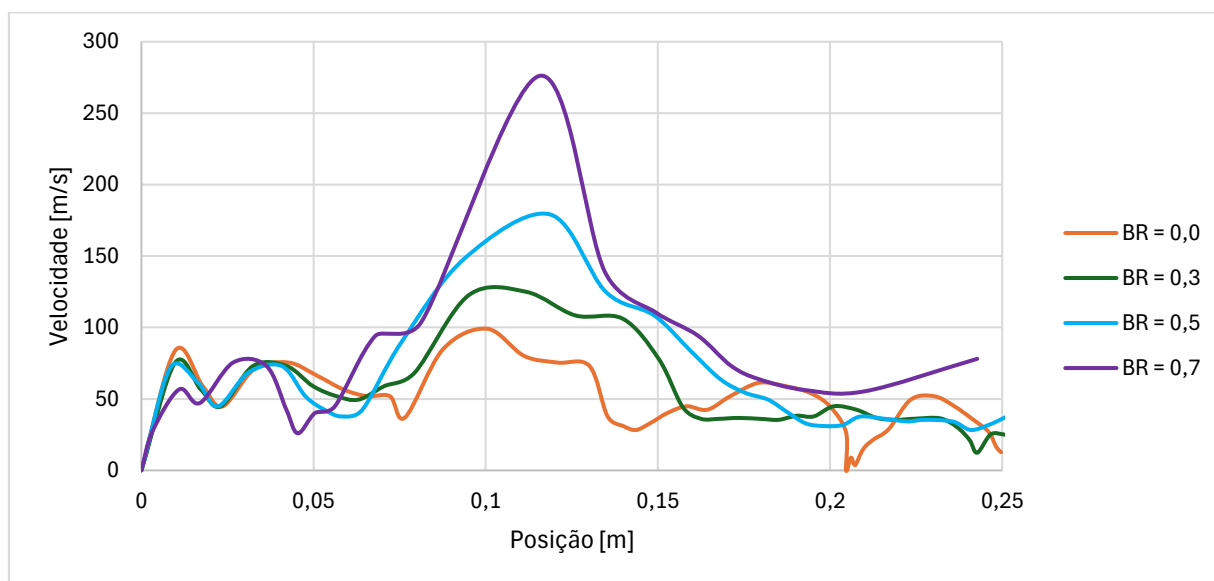


Figura 4.12 – Comparativo da velocidade da frente de chama em função da posição para diferentes razões de bloqueio.

Observa-se que a curva referente ao caso sem obstáculos (razão de bloqueio igual a zero) apresenta menores amplitudes de velocidade ao longo de todo o escoamento e com valores médios mais baixos.

Para os casos com obstáculos (razões de bloqueio de 0,3, 0,5 e 0,7), faz-se perceptível um aumento significativo da velocidade máxima atingida, principalmente para o caso de maior bloqueio. A curva correspondente à $BR = 0,7$ apresenta um pico de velocidade próximo da posição de 0,12 metros, atingindo valores superiores a 250 m/s. Esse comportamento está diretamente associado ao forte processo de aceleração da frente de chama, intensificado pelo confinamento geométrico e pela maior taxa de turbulência induzida pelos obstáculos.

A razão de bloqueio de 0,5 também possui um comportamento consistente, com valores intermediários entre os casos de 0,3 e 0,7, apresentando um pico localizado similar ao caso de maior BR, com velocidades da ordem de 180 m/s. Já a razão de bloqueio de 0,3 mostra

aceleração menos intensa, mas ainda significativamente maior que o caso sem obstáculos, com valores em torno de 120 m/s no ponto de máximo.

Além desses aspectos, após os picos observados, todas as curvas apresentam tendência de redução gradual da velocidade conforme a frente de chama se propaga em direção à outra extremidade do duto. Esse comportamento é gerado pela dissipação da turbulência.

Dessa forma, os resultados evidenciam que o aumento da razão de bloqueio exerce papel crucial no processo de aceleração da chama e no crescimento da velocidade do escoamento. Enquanto o caso sem obstáculos apresenta evolução mais suave e limitada, os casos com BR igual a 0,5 e 0,7 mostram que a presença de obstáculos intensifica os mecanismos de instabilidade hidrodinâmica e turbulenta, resultando em maiores amplitudes de velocidade e picos mais pronunciados.

4.3 Resultados obtidos para as simulações com obstáculos de diferentes Φ

Além da variação de BR, também foram simulados casos com diferentes razões de equivalência (Φ), a fim de determinar a magnitude do impacto desse parâmetro na velocidade de frente de chama quando comparado com as alterações no BR

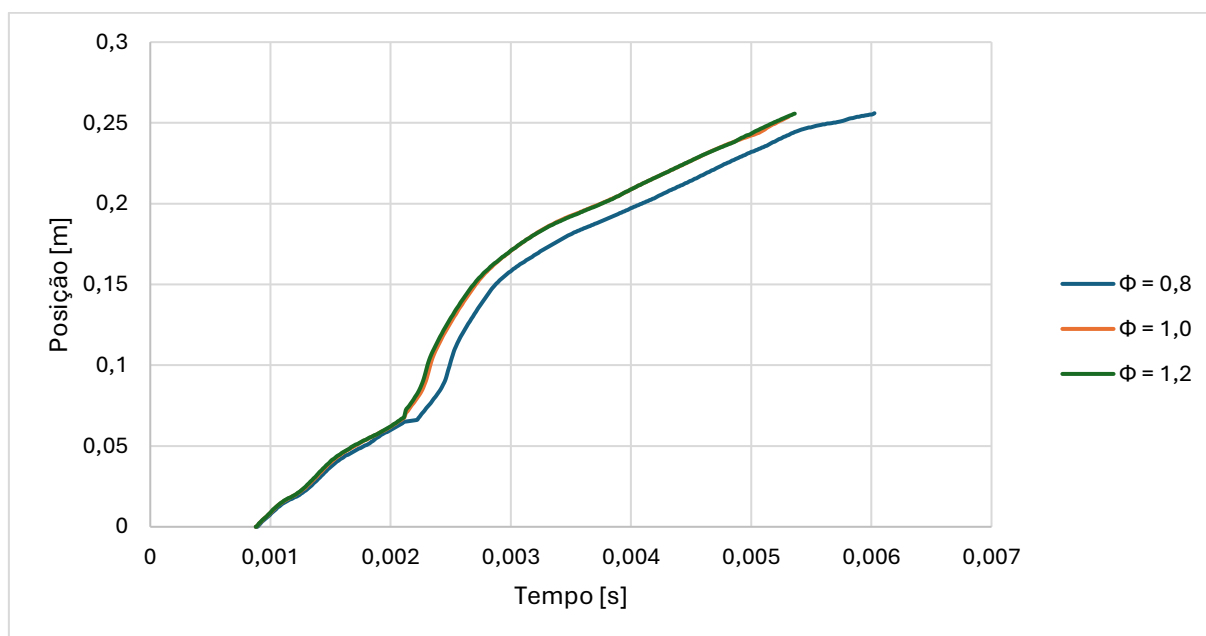


Figura 4.13 – Comparativo da posição da frente de chama em função do tempo para diferentes razões de equivalência ($\Phi = 0,8; 1,0; 1,2$), com razão de bloqueio fixa em BR = 0,5.

O gráfico apresentado na Figura 4.13 permite avaliar o impacto da razão de equivalência na evolução temporal da frente de chama em um canal confinado contendo obstáculo com razão de bloqueio intermediária ($BR = 0,5$). Três condições de mistura foram analisadas, sendo elas a mistura pobre ($\Phi = 0,8$), estequiométrica ($\Phi = 1,0$) e mistura rica ($\Phi = 1,2$).

Observa-se que as curvas correspondentes a $\Phi = 1,0$ e $\Phi = 1,2$ apresentam sobreposição quase completa ao longo de todo o intervalo temporal avaliado. Essa coincidência sugere que, para o presente arranjo geométrico e regime de escoamento, o acréscimo de combustível da condição estequiométrica para a condição rica não resultou em ganho significativo de velocidade de propagação da frente de chama.

Esse comportamento pode estar associado a uma limitação do transporte e da turbulência local. Em escoamentos confinados com obstáculo, a aceleração da frente é fortemente controlada pela intensificação de turbulência a jusante, pelo alongamento da frente e pela recirculação, sendo menos sensível a pequenas variações no poder calorífico da mistura. Caso a intensidade turbulenta e o campo de escoamento já estejam saturados para $\Phi = 1,0$, aumentos adicionais na razão de equivalência tendem a não acelerar de forma significativa o avanço da frente.

Outra hipótese é que o presente mecanismo cinético simplificado de 1 passo não foi capaz de capturar as variações na propagação de chama relacionados à variação da razão de equivalência. Para mecanismos mais detalhados, espera-se encontrar uma divergência mais notória para variações na razão de equivalência maiores que 1,0.

Já a curva referente à mistura pobre ($\Phi = 0,8$) apresenta atraso evidente na evolução da posição da frente de chama desde os primeiros instantes. Esse comportamento é consistente com a menor velocidade de chama típica de misturas pobres, decorrente da menor temperatura de chama adiabática e da redução na taxa global de liberação de calor. Além disso, a menor energia liberada implica gradientes de pressão menos intensos e, portanto, menor produção de vorticidade via mecanismo baroclínico, o que reduz a capacidade de aceleração turbulenta da frente.

Assim, a análise indica que, para $BR = 0,5$, a transição de $\Phi = 1,0$ para $\Phi = 1,2$ não gera benefício expressivo em termos de avanço da frente, ao passo que a redução da razão de equivalência para valores abaixo da estequiometria impacta de forma marcante a velocidade de propagação. Esses resultados sugerem que a condição estequiométrica já explora de forma quase máxima o potencial hidrodinâmico e termoquímico do sistema, e que enriquecimentos

adicionais não implicam ganhos relevantes no regime de propagação avaliado. Ou que o mecanismo simplificado implementado possui como deficiência o modelamento correto desse fenômeno para misturas enriquecidas.

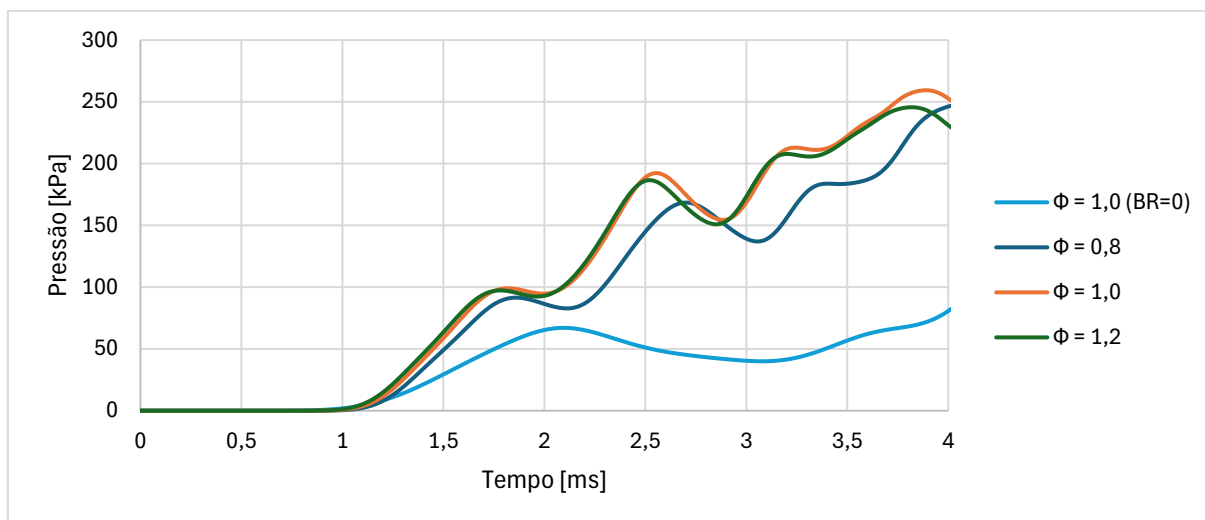


Figura 4.14 – Evolução temporal da pressão para diferentes razões de equivalência ($\Phi = 0,8$; $1,0$; $1,2$) no caso com razão de bloqueio $BR = 0,5$, com comparação aos dados de Jiang et al., 2024, sem obstáculos.

A Figura 4.14. apresenta os valores da pressão em função do tempo para as diferentes razões de equivalência testadas. Além desse fator, elas foram comparadas com a condição sem obstáculos, a fim de tornar visível o aumento de pressão quando se tem obstáculos inclusos. Observa-se que as curvas para $\Phi = 1,0$ e $\Phi = 1,2$ praticamente se sobrepõem, com diferenças mínimas, indicando que a condição estequiométrica já maximiza o efeito de intensificação da pressão neste arranjo. A mistura pobre ($\Phi = 0,8$) apresenta picos iniciais menores e atrasados devido à menor velocidade de chama e taxa de liberação de calor, mas converge para valores próximos (235–240 kPa) aos demais no final do espaço de tempo analisado.

A comparação com os dados sem obstáculos, evidencia a variação do comportamento da pressão na ausência de barreiras. A pressão máxima é quase metade da registrada nos casos com BR, confirmando que a interação chama–obstáculo potencializa a geração de vorticidade, acelera a frente e amplifica a pressão.

4.4 Análise da influência de obstáculos na frente de chama

A Figura 4.15 mostra a evolução do campo de pressão estática quando a frente de chama interage com a barreira. A coloração revela, a cada instante, lóbulos de sobrepressão e depressão que se organizam ao redor das quinas do obstáculo e migram para jusante à medida que a frente progride. A linha preta posiciona a isosuperfície (interface reagente/produto), permitindo relacionar diretamente picos de pressão com a geometria da frente. A Figura 4.15 apresenta também a diferença de pressão na geometria. Assim como anteriormente, as análises se tornam mais objetivas quando segmentadas por instantes de tempo fixos.

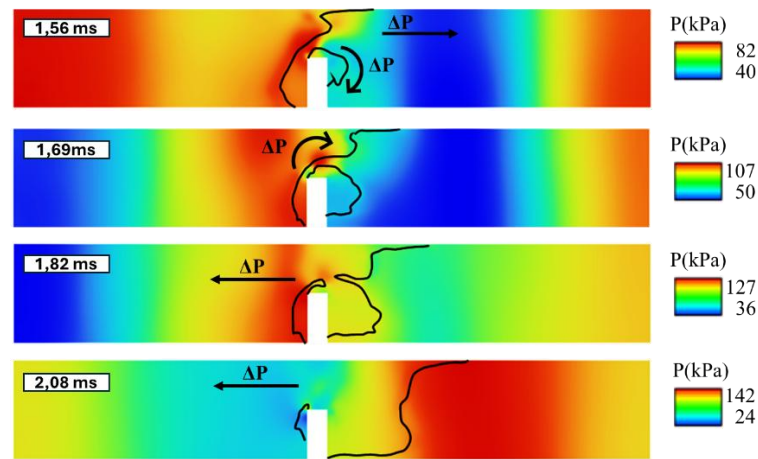


Figura 4.15 –Mapa de contorno de pressão com sobreposição da frente de chama (linha preta) para $BR = 0,5$ e $\Phi = 1,0$ nos instantes 1,56; 1,69; 1,82; e 2,08 ms.

Figura 4.15: (1,56 ms) – Formação de lóbulos de sobrepressão a montante e afunilamento lateral

Antes da transposição, a região de montante do obstáculo apresenta uma pressão elevada, com máximos localizados nas quinas (bordas superior e inferior do obstáculo). Esse padrão é típico do escoamento afunilado nos canais laterais e sugere a presença de ondas de compressão fracas geradas pela expansão dos produtos atrás da chama e refletidas pela barreira. A frente de chama (linha preta) já se curva em direção aos canais, e os fortes gradientes de pressão nas quinas não são colineares com os gradientes de massa específica através da frente, o que ativa a produção baroclínica de vorticidade, que explica o início do enrugamento e a futura assimetria da frente ao contornar a barreira.

Figura 4.15: (1,69 ms) – Depressão na esteira nascente e concentrações de pressão nas bordas de jusante

Com a frente parcialmente contornando o obstáculo, estabelece-se uma depressão pronunciada (região azul) imediatamente a jusante, compatível com o núcleo recirculante da esteira. Em compensação, surgem lóbulos de sobrepressão aderidos às quinas a jusante (impacto e desaceleração dos jatos laterais), gerando cisalhamento intenso nas camadas de separação. O encontro da frente com esses gradientes de pressão transversais intensifica o mecanismo baroclínico e cria as condições para a amplificação de KH nas camadas de cisalhamento dos jatos.

Figura 4.15: (1,82 ms) – Migração dos picos de pressão

O lóbulo de sobrepressão descola das quinas e migra para o núcleo central, enquanto a depressão na esteira se reorganiza lateralmente. Essa redistribuição de pressão ao redor da frente de chama, visível pela proximidade entre máximos de pressão e a concavidade da chama, está associada ao enrugamento da chama. Observando a partir do ponto de vista de instabilidades, a RM é responsável pelas compressões/reflexões que cruzam a interface alimentam vorticidade baroclínica, acelerando o enrugamento local. Já a RT é responsável pela interface gás de menor massa específica (produtos) empurrando gás de maior (reagentes) que sofre aceleração efetiva aumentando a taxa de crescimento das ondulações e sustentando a concavidade típica do fenômeno.

Figura 4.15: (2,08 ms) – Reconfiguração da esteira, re-adesão e reforço de assimetria

Após a passagem, o campo de pressão mostra depressão alargada na esteira e máximos compactos em pontos de re-adesão (impacto dos jatos no escoamento central). A frente, agora mais distorcida, cruza regiões com diferença de pressão elevada, mantendo produção baroclínica e cisalhamento. A assimetria dos lóbulos de pressão esquerda/direita reflete diferenças de carga entre os jatos laterais, coerente com a quebra de simetria já observada nas comparações qualitativas.

O mapa de contorno de pressão com a frente sobreposta é decisivo para identificar onde e quando as instabilidades são energizadas com picos junto às quinas e regiões de re-adesão que sustentam KH, enquanto os cruzamentos de compressões com a interface alimentam RM, a própria redistribuição de pressão normal à frente desencadeia RT. Essa leitura complementa e explica as morfologias e as curvas apresentadas nos itens anteriores.

A Figura 4.16 apresenta a evolução da magnitude de velocidade do escoamento no entorno do obstáculo ($BR = 0,5$, mistura estequiométrica), cobrindo o intervalo desde a aproximação da frente até a passagem da chama a jusante da barreira.

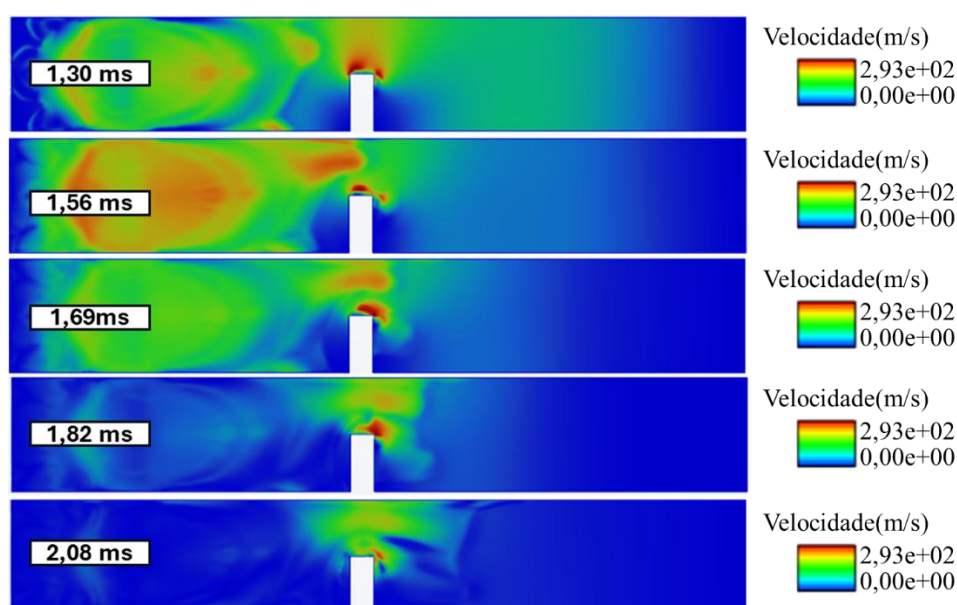


Figura 4.16 – Mapas de contorno da magnitude da velocidade no plano médio para $BR = 0,5$ e $\Phi = 1,0$, em cinco instantes (1,30; 1,56; 1,69; 1,82; 2,08 ms).

Em 1,30–1,56 ms destaca-se uma região de altas velocidades junto às quinas de jusante do obstáculo (regime de “gargalo” lateral), seguida pela formação de jatos laterais que contornam a barreira.

Em 1,69–1,82 ms aparece um núcleo de baixa velocidade (esteira/recirculação) imediatamente a jusante, com manchas localizadas de alta velocidade próximas às quinas, que é uma assinatura de camadas de cisalhamento intensificadas. Em 2,08 ms o campo permanece dominado por velocidades moderadas/baixas na esteira, com focos estreitos de velocidade elevados na re-adesão do escoamento.

Essa leitura é coerente com o mecanismo físico descrito anteriormente no qual a obstrução aumenta a velocidade nos canais laterais intensificando cisalhamento e recirculações a jusante, e assim, a frente de chama que interage com esse campo tem sua área superficial e seu estiramento aumentados. Para os objetivos centrais deste estudo (identificação de zonas de enrugamento da frente e das instabilidades que aceleram a combustão), o mapa de contorno da magnitude de velocidade mostrou-se pouco representativo quando comparado com os demais, embora tenha deixado claro as zonas de afunilamento, por três razões principais:

A. Ausência de informação de regiões de diferentes pressões.

Mapas de velocidade não distinguem regiões dominadas por cisalhamento (KH) de zonas com rotação/recirculação efetiva. Por isso, o diagnóstico de KH nas camadas laterais e na esteira é limitado quando se observa apenas a velocidade.

B. Impossibilidade de isolar mecanismos compressíveis e baroclínicos.

As distorções e re-acelerações locais dependem de ondas de pressão, compressões/reflexões e do termo baroclínico de geração de vorticidade. O mapa de velocidade não carrega essa informação, já os mapas de contorno pressão e temperatura evidenciam onde compressões incidem sobre a interface reativa, permitindo inferir as instabilidades (pela aceleração efetiva da interface).

C. Baixa correlação local com a localização precisa da frente.

Embora picos de velocidade sinalizem “gargalos”, o enrugamento da chama é melhor identificado onde gradientes térmicos e químicos são máximos. Por isso, mapas de temperatura correlacionam-se muito mais diretamente com a cinética local e com a topologia da frente do que a velocidade.

Em termos do que a Figura 4.16 ainda permite concluir, o pico de velocidade junto às quinas do obstáculo (1,30–1,56 ms) confirma o afunilamento e a formação de camadas de cisalhamento laterais, com um ambiente propício a KH. A região de baixa velocidade centrada a jusante (1,69–1,82 ms) indica um núcleo recirculante que tende a aprisionar reagente,

mecanismo conhecido por intensificar a mistura e favorecer ignições locais quando analisado em conjunto com temperatura.

Contudo, do ponto de vista do diagnóstico, a velocidade não é a métrica mais eficaz para identificar zonas de enrugamento, sendo melhor para aferir as zonas de afunilamento. Para esses propósitos, o produto que melhor apresenta os mecanismos foi a análise da pressão em conjunto com a temperatura, sendo o mapa de contorno da magnitude da velocidade um complemento.

A Figura 4.17 apresenta a evolução da magnitude de vorticidade no escoamento durante a interação da frente de chama com o obstáculo, permitindo identificar as regiões de maior geração e transporte de rotação local do fluido. A vorticidade é o rotacional da velocidade, refletindo tanto efeitos hidrodinâmicos (cisalhamento e separação) quanto termodinâmicos (produção baroclínica associada ao desalinhamento entre gradientes de pressão e massa específica).

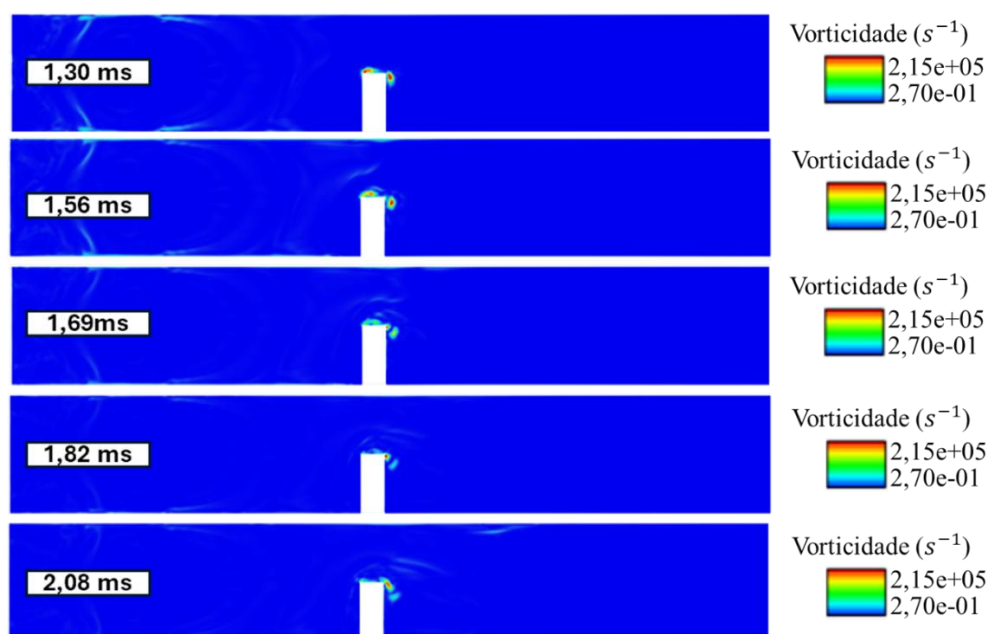


Figura 4.17 – Distribuição da magnitude de vorticidade para $BR = 0,5$ e $\Phi = 1,0$ nos instantes 1,30; 1,56; 1,69; 1,82; e 2,08 ms.

Nos primeiros instantes de interação, as zonas de vorticidade máxima localizam-se nas quinas do obstáculo voltadas para montante. Esse padrão está associado ao desvio do escoamento e à formação de camadas de cisalhamento laterais, resultando de gradientes acentuados de velocidade entre os gases em expansão atrás da frente e o escoamento ainda não perturbado nos canais laterais.

O campo de vorticidade revela o papel central das quinas do obstáculo como pontos-fonte de rotação por cisalhamento. Esse mecanismo atua de forma a alimentar instabilidades hidrodinâmicas e interfaciais. A presença e intensidade dessas zonas de vorticidade são consistentes com os padrões morfológicos da frente de chama discutidos nos itens anteriores e ajudam a explicar a sensibilidade do escoamento a variações na razão de bloqueio e no regime de ignição.

4.5 Comparativo da velocidade máxima para todos os casos simulados

A fim de tornar a visualização clara da influência de parâmetros chave na velocidade de frente de chama, uma tabela simplificada foi formulada.

Tabela 4.1 – Velocidade para todos os casos simulados

Φ	Razão de bloqueio	Velocidade máxima [m/s]	Tempo de trânsito [s]
1,0	0,0	101,45	0,006533
	0,3	139,23	0,005753
	0,5	214,62	0,005181
	0,7	292,56	0,004297
0,8	0,3	136,84	0,006143
	0,5	214,70	0,005610
	0,7	268,89	0,005350
1,2	0,3	141,54	0,005597
	0,5	210,00	0,005155
	0,7	297,26	0,004830

A tabela apresentada reúne, para todas as combinações de razão de bloqueio e razão de equivalência analisadas, dois parâmetros principais, a velocidade máxima atingida pela frente de chama ao longo do duto e o tempo de trânsito, que é o tempo necessário para que esta frente atinja a face a jusante localizada a 0,276 metros do ponto de ignição. Estes dois parâmetros permitem sintetizar os efeitos combinados da geometria do escoamento, associada à presença de obstáculos, e das condições termoquímicas impostas pela mistura, proporcionando uma visão integrada do comportamento observado nos diferentes casos.

Os resultados indicam que o aumento da razão de bloqueio provoca um crescimento consistente e expressivo da velocidade máxima da frente de chama, acompanhado por uma

redução do tempo para alcançar a face a jusante. Dessa forma, quanto maior a obstrução, maiores são os picos de velocidade e menor é o tempo de chegada. Este comportamento está em concordância com as análises do mapa de contorno de temperatura e pressão discutidas anteriormente, nas quais foi evidenciado que a obstrução intensifica a formação de jatos, tensões de cisalhamentos, deformações e zonas de recirculação, aumentando a área reativa e acelerando a liberação de energia. Como esperado, o caso com razão de bloqueio de 0,7 apresentou os maiores valores de velocidade máxima e os menores tempos de trânsito, enquanto o caso sem obstáculos apresentou os valores mais baixos para a velocidade e mais altos para o tempo de trânsito.

Em relação à razão de equivalência, para uma mesma geometria, observa-se que a mistura pobre, com razão de equivalência de 0,8, resulta em menores velocidades máximas e maiores tempos para alcançar a face a jusante, reflexo da menor velocidade de chama laminar e da menor intensidade dos gradientes de pressão. Já entre as razões de equivalência de 1,0 e 1,2, as diferenças apresentadas foram pequenas, com curvas praticamente sobrepostas ao longo do tempo. Isso indica que a condição estequiométrica já é suficiente para maximizar o efeito combinado entre reatividade química e intensificação hidrodinâmica promovida pelo obstáculo, de forma que o enriquecimento adicional da mistura não produza ganhos relevantes.

A análise combinada permite afirmar que a condição que gera maiores picos de velocidade e menor tempo de chegada, é obtida com razão de bloqueio elevada, próxima de 0,7, e razão de equivalência entre 1,0 e 1,2. Por outro lado, a condição de menor velocidade, associada a menor desempenho, corresponde à ausência de obstáculos e às misturas pobres. Esses resultados confirmam que a geometria obstruída exerce papel dominante na aceleração da chama e no aumento dos picos de pressão, enquanto a operação próxima à estequiometria potencializa a resposta do sistema.

A Figura 4.18 mostra a relação entre a velocidade máxima da frente de chama e a razão de equivalência para diferentes razões de bloqueio.

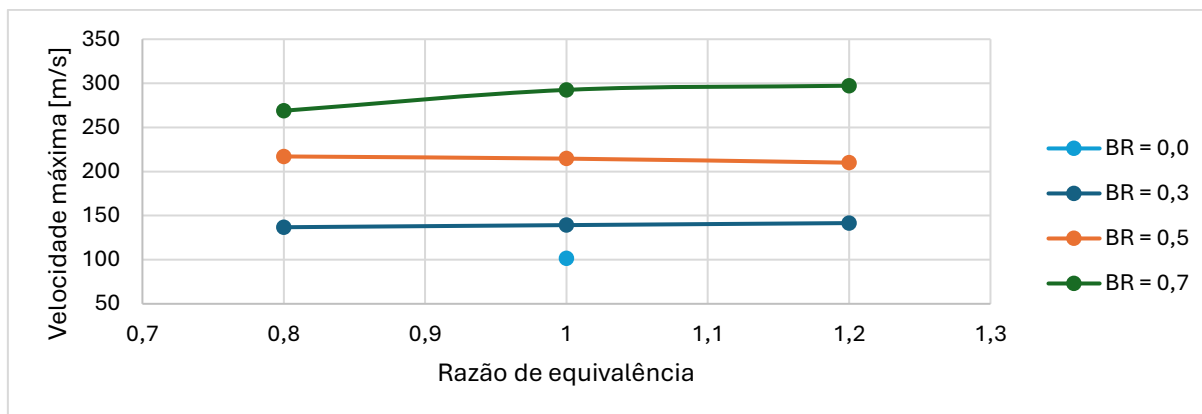


Figura 4.18 – Velocidade máxima em função da razão de equivalência

Observa-se que, para todos os casos, o aumento da razão de equivalência provoca apenas pequenas variações na velocidade máxima atingida. A condição sem obstáculos apresentou a menor velocidade máxima, enquanto a presença de obstáculos favoreceu o incremento da velocidade da chama. Entre as razões de bloqueio, destaca-se a de 0,7, que resultou nas maiores velocidades máximas. Esses resultados reforçam que a intensidade da aceleração da frente de chama está fortemente associada ao grau de bloqueio no escoamento, estando em concordância com os resultados obtidos por Jian et al., 2024. Enquanto a variação da razão de equivalência não pode ser aferida com precisão, mas nos resultados numéricos do presente estudo teve efeito secundário.

A Figura 4.19 apresenta em forma gráfica os dados experimentais gerados por Jiang et al., 2024, que mostram o comportamento da velocidade máxima da frente de chama em função da razão de equivalência para diferentes valores de BR.

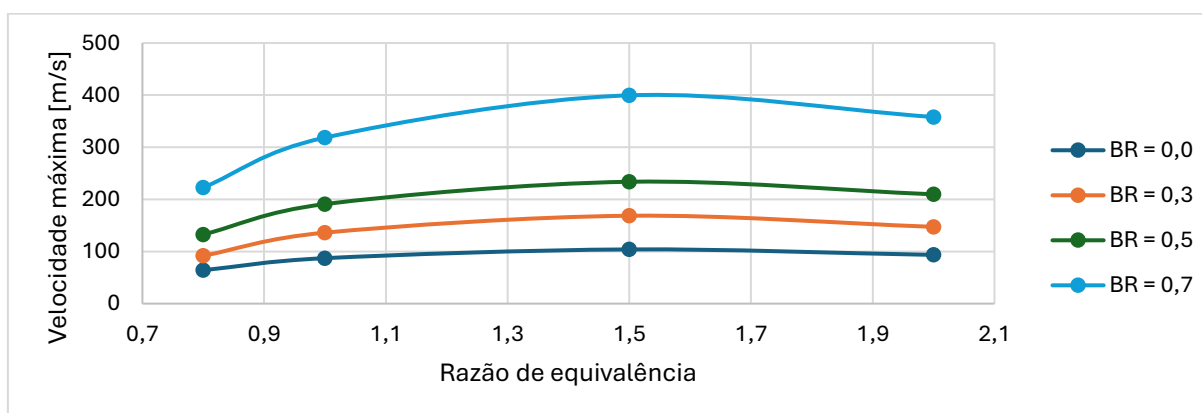


Figura 4.19 – Velocidade máxima em função da razão de equivalência para os dados experimentais de Jiang et al., 2024.

Observa-se que, para todas as condições analisadas, a velocidade apresenta uma tendência crescente até valores próximos da razão de equivalência igual a 1,5, a partir da qual ocorre uma leve queda. Esse comportamento sugere que há um ponto ótimo de mistura combustível-ar, no qual a propagação da frente de chama atinge sua intensidade máxima antes de decrescer em regimes mais ricos.

Esse comportamento não se fez muito claro na presente pesquisa. Esse fator está possivelmente atrelado ao uso do mecanismo cinético simplificado de 1 passo. Desta forma, faz-se evidente a limitação desse tipo de mecanismo aplicado ao presente estudo. O presente modelo se faz válido para casos com razão de equivalência próximos a 1,0, porém quando há um determinado enriquecimento o modelo possui dificuldades em considerar as possíveis alterações.

Assim como nos dados observados no presente estudo, a comparação entre as diferentes razões de bloqueio evidencia que a presença de obstáculos no escoamento exerce papel determinante na intensificação da velocidade da frente de chama.

Esse comportamento reforça a conclusão de que a interação entre a razão de equivalência e a geometria do escoamento é determinante para a aceleração da chama. A existência de um ponto ótimo na mistura combustível-ar, associado à configuração geométrica do duto, sugere que os mecanismos de turbulência e compressibilidade induzidos pelos obstáculos contribuem de maneira a intensificar a frente de chama, corroborando os achados do estudo de Jiang et al., 2024.

A Figura 4.20 descreve o comportamento do tempo de trânsito da frente de chama em função da razão de equivalência para diferentes razões de bloqueio.

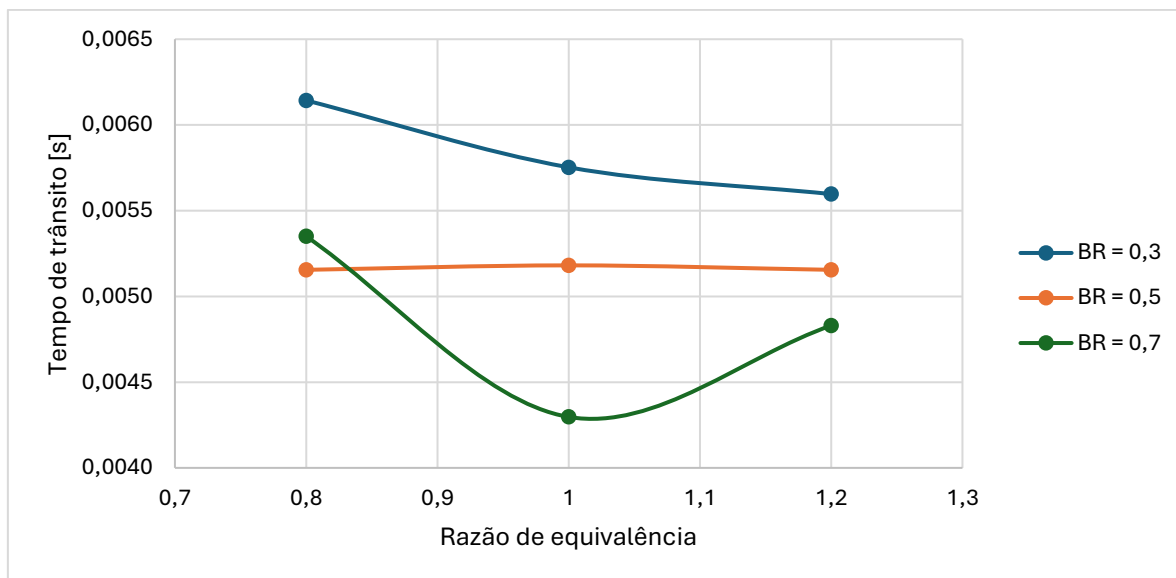


Figura 4.20 – Tempo de trânsito em função da razão de equivalência

Observa-se que, para o caso com razão de bloqueio de 0,3, o tempo de trânsito apresenta uma leve tendência de redução à medida que a razão de equivalência aumenta. Já no caso da razão de bloqueio de 0,5, o comportamento é ainda mais uniforme, apresentando variações muito ínfimas e praticamente constantes em torno de 5,1 milissegundos, independentemente da razão de equivalência considerada.

Já a razão de bloqueio de 0,7 apresentou maior sensibilidade à variação da razão de equivalência. Nesse caso, verifica-se uma redução acentuada no tempo de trânsito ao se passar de uma razão de equivalência de 0,8 para 1,0, diminuindo de aproximadamente 5,3 milissegundos para 4,3 milissegundos, embora a velocidade máxima não houvesse variações de elevada magnitude. Este comportamento sugere que, em condições próximas a estequiométrica, o escoamento e a interação da chama com os obstáculos são mais eficientes, resultando em um avanço mais rápido da frente de chama ao longo do duto.

De forma geral, os resultados indicam que o tempo de trânsito é significativamente influenciado pela razão de bloqueio, e em menor magnitude, pela razão de equivalência. Enquanto razões de bloqueio intermediárias (0,5) mantêm comportamento estável, a maior razão de bloqueio (0,7) demonstra maior sensibilidade às variações da mistura, refletindo a complexidade das interações entre turbulência, liberação de calor e aceleração da chama.

Por fim, foi gerada uma tabela que possui os valores das velocidades máximas obtidos no presente estudo e aqueles mencionados na pesquisa de Jiang et al., 2024. Esses dados são apresentados na Tabela 4.2. Adjunto a esses dados, os gráficos para os comportamentos de

posição, velocidade e pressão para as diferentes condições testadas estão dispostos no Apêndice A.

Tabela 4.2 – Velocidade máxima para o presente estudo em comparação com o estudo referência.

Φ	BR	Velocidade máxima [m/s]		Erro relativo
		Presente estudo	Jiang et al., 2024.	
0,8	0	-	64,15	-
	0,3	136,84	91,84	49,00%
	0,5	214,70	132,63	61,88%
	0,7	268,89	222,72	20,73%
1	0	101,45	87,24	16,29%
	0,3	139,23	136,15	2,26%
	0,5	214,62	190,97	12,38%
	0,7	292,56	318,53	-8,15%
1,2	0	-	-	-
	0,3	141,54	-	-
	0,5	210,00	-	-
	0,7	297,26	-	-

A partir da comparação entre os dados obtidos no presente estudo e aqueles reportados por Jiang et al., 2024, faz-se possível estabelecer uma análise mais abrangente do comportamento da propagação da chama em função da razão de equivalência e da razão de bloqueio. Observa-se que, de maneira geral, as tendências entre ambos os estudos apresentam coerência. O aumento da razão de bloqueio está associado à elevação das velocidades máximas atingidas. Maiores valores para o erro relativo residem na faixa de razão de equivalência igual a 0,8. Essa divergência mais acentuada se faz justificada por conta da utilização de um único mecanismo simplificado de 1 passo utilizado para a equação de Arrhenius. Já para misturas estequiométricas o erro relativo máximo foi de 16,29%, valor esse que foi considerado aceitável para estabelecimento dos resultados.

Existem diferenças quantitativas leves, em que para valores baixos de razão de bloqueio, como 0,3, os resultados da presente pesquisa indicaram velocidades superiores às reportadas por Jiang et al., 2024, especialmente na razão de equivalência de 1,0. Enquanto as maiores discrepâncias podem estar relacionadas a limitação do mecanismo simplificado em simular com

precisão divergências em relação a condição estequiométrica. Para razões de bloqueio mais elevadas, como 0,7, tem-se uma supervalorização na ordem de 46,62 m/s para a razão de equivalência de 0,8, e uma subestimação de 25,97 m/s na razão de equivalência equivalente a 1,0.

Outro aspecto relevante é a influência da razão de equivalência. Enquanto os dados de Jiang et al., 2024, se estendem para faixas mais amplas, incluindo equivalências superiores a 1,5, no presente estudo os valores máximos se concentraram no intervalo entre 0,8 e 1,2, faixa na qual foi observada a menor similaridade no comportamento das curvas.

Assim, a comparação evidencia tanto a robustez dos resultados obtidos, ao reproduzirem tendências já descritas na literatura, quanto a contribuição original do presente trabalho, que reforça o entendimento dos efeitos da razão de bloqueio e da equivalência no regime de propagação da chama em dutos confinados.

5 CONCLUSÕES

O presente estudo investigou, por meio de Simulações de Grandes Escalas (LES) com submalha de Smagorinsky–Lilly no ANSYS Fluent, a propagação de chamas pré-misturadas de hidrogênio-ar em duto confinado com e sem obstáculos, quantificando o efeito da razão de bloqueio (BR) e da razão de equivalência (Φ) sobre a aceleração da frente de chama, as sobrepressões e a morfologia da frente. O modelo computacional foi configurado para capturar explicitamente as grandes estruturas turbulentas, modelando os efeitos de submalha via viscosidade turbulenta dependente do tensor de deformação filtrado, com tratamento de parede Werner–Wengle, o que se mostrou adequado à física do problema e à geometria empregada.

Para extração quantitativa, a posição e a velocidade de frente de chama foram determinadas a partir da isosuperfície de $T=1000$ K e pós processamento no ParaView, permitindo comparação direta com dados experimentais de referência (Jiang et al., 2024) para o caso sem obstáculos. A análise comparativa mostrou boa compatibilidade na fase intermediária/final do escoamento, ainda que com divergência inicial atribuída à necessidade de maior refinamento próximo à ignição para capturar morfologias primárias (como a chama plana). Além dessa necessidade, maior refinamento temporal (menor valor de CFL) podem ser fatores influentes na geração dessa morfologia. A análise de sensibilidade de malha corroborou essa interpretação e motivou a adoção da malha de 1 milhão de elementos como compromisso entre custo e precisão.

Uma vez validado, o modelo foi empregado para mapear os efeitos da BR (0,3; 0,5; 0,7) e da Φ (0,8; 1,0; 1,2). Os resultados reunidos (velocidade máxima de frente e tempo de trânsito até 0,276 m após a ignição) evidenciaram que a geometria obstruída promove aceleração. O aumento de BR elevou a velocidade máxima e reduziu o tempo de chegada, com o caso BR = 0,7 apresentando os picos mais altos e o menor tempo de trânsito. Já o duto sem obstáculos exibiu os menores valores para velocidade máxima e maior tempo de trânsito.

Do ponto de vista de mecanismos, os campos resolvidos de vorticidade e pressão indicam as quinas do obstáculo como fontes locais de rotação por cisalhamento. O estreitamento da seção efetiva intensifica jatos laterais, gradientes de pressão e cisalhamento, alimentando instabilidades (Kelvin–Helmholtz, Richtmyer–Meshkov e Rayleigh–Taylor) que enrugam a frente, ampliam a área reativa e, por consequência, aceleram a chama. Dessa forma, tem-se a hierarquia de BR $0,7 > 0,5 > 0,3 >$ sem obstáculo nas métricas de deslocamento e pressão.

Quantitativamente, para $\Phi = 1,0$, registrou-se aumento de velocidade máxima de 101,45 m/s (sem obstáculo) para 292,56 m/s ($BR = 0,7$), enquanto o tempo até 0,276 m decresceu de 6,53 ms para 4,30 ms, capturando o papel amplificador dos obstáculos. Adicionalmente, o ponto de monitoramento de pressão indica que $BR = 0,7$ produz sobrepressões na ordem de 550 kPa por volta de 3,2 ms, superiores às de $BR = 0,5$ e $0,3$ e muito acima do caso sem obstáculos (120 kPa), reforçando o acoplamento entre aceleração da frente e compressões transitórias induzidas pela obstrução.

A razão de equivalência modulou os resultados de modo secundário frente a BR . Para $BR = 0,5$, as curvas de posição/tempo e de pressão para $\Phi = 1,0$ e $1,2$ praticamente se sobrepõem ao longo do intervalo analisado, sugerindo uma saturação da intensificação hidrodinâmica já em estequiometria ou uma incapacidade do mecanismo cinético de passo único em simular de forma precisa essa variação. A mistura pobre ($\Phi = 0,8$) reduziu a velocidade máxima e atrasou o trânsito da frente, coerente com a menor velocidade laminar e gradientes de pressão mais fracos. Em resumo, operar próximo à estequiometria maximiza a resposta para o arranjo geométrico considerado, ao passo que enriquecimentos adicionais não geram ganhos relevantes no regime investigado.

Em relação a morfologia, a sequência qualitativa obtida reproduziu formatos característicos da combustão de hidrogênio-ar confinado (incluindo *tulip flame* e *distorted tulip flame*) quando a energia/raio inicial de ignição foi suficientemente alta. A chama plana inicial não foi observada com o refinamento adotado, explicando a pequena defasagem inicial nas validações de posição e pressão e confirmando a necessidade de maior resolução local para capturar transições morfológicas iniciais.

Em síntese, o estudo implementou e validou um modelo numérico com LES e Smagorinsky–Lilly de submalha para chamas de hidrogênio-ar em duto confinado. Dessa forma obteve e comparou quantitativamente velocidades de frente com dados experimentais, após determinar uma isosuperfície de 1000 K, mensurou o impacto de BR e Φ , demonstrando a dominância geométrica de BR na aceleração e nas sobrepressões. Além disso, a pesquisa ofereceu uma visão integrada dos mecanismos (jatos, cisalhamentos, recirculações, produção baroclínica) que sustentam a sensibilidade do sistema aos obstáculos.

As principais limitações residem no refinamento insuficiente na vizinhança da ignição para resolução fidedigna das morfologias iniciais, e no emprego de mecanismo químico simplificado e de um único modelo SGS. Apesar desses fatores, a malha adotada e o pós-

processamento implementado mostraram-se suficientes para o regime de interesse (intermediário/final), com validações coerentes em posição e pressão.

Os resultados possuem relevância prática direta para avaliação de risco e projeto de dispositivos nas quais misturas de hidrogênio podem se inflamar em geometrias parcialmente obstruídas, aumenta-se a credibilidade de que variações em BR (0,5 para 0,7) alteram significativamente picos de pressão e tempos de trânsito, enquanto operar no entorno da estequiometria já aciona o pico hidrodinâmico do arranjo, limitando o ganho de mais combustível.

Em conclusão, confirmam-se as hipóteses centrais desta pesquisa. A primeira de que a inclusão de obstáculos acelera de forma expressiva a frente de chama e amplifica sobrepressões, por via de intensificação de turbulência e acoplamento com ondas de compressão. A segunda hipótese de que a razão de bloqueio é o parâmetro geométrico dominante na dinâmica observada. E a razão de equivalência exerce efeito secundário no regime analisado, com misturas pobres desacelerando a frente e enriquecimentos a aumentando. O modelo numérico validado, aliado à análise em questão, fornece base sólida para execução do projeto e para investigações futuras mais detalhadas.

5.1 Sugestões para Trabalhos Futuros

Como sugestões para trabalhos futuros tem-se as seguintes:

1. Refinamento adaptativo na região de ignição e nas vizinhanças dos obstáculos, visando capturar a chama plana e transições morfológicas iniciais com maior fidelidade e reduzir a divergência inicial na validação;
2. Refinamento temporal, fazendo uso de passos de tempo menores;
3. Modelagem química mais detalhada (mecanismos detalhados) e comparação entre diferentes SGS para avaliar sensibilidade da solução e robustez preditiva;
4. Efeitos de parede e perdas térmicas e condições de contorno acústicas para quantificar a influência de reflexão em picos de pressão;
5. Escalonamento geométrico e dimensional (comprimento do duto, seções transversais alternativas) e impacto de diferentes tipos de obstáculos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANSYS, Inc. **Ansys Fluent User's Guide**. Release 2021 R2. Canonsburg, PA: ANSYS, Inc., 2021.

ANSYS, Inc. **Ansys Fluent Theory Guide**. Release 2021 R2. Canonsburg, PA: ANSYS, Inc., 2021.

ANSYS, Inc. **Ansys Fluent Release Notes**. Release 2021 R1. Canonsburg, PA: ANSYS, Inc., 2021.

Anuchina, N. N., Volkov, V. I., Gordeychuk, V. A., Es'kov, N. S., Ilyutina, O. S., & Kozyrev, O. M. **Numerical simulations of Rayleigh–Taylor and Richtmyer–Meshkov instability using MAH-3 code**. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 168, p. 11-20, 2004. doi: 10.1016/j.cam.2003.06.008

Bambauer, M., Hasslberger, J., Ozel-Erol, G., Chakraborty, N., & Klein, M. **Surface topologies and self interactions in reactive and nonreactive Richtmyer–Meshkov instability**. *Scientific Reports*, v. 13, p. 837, 2023.

Bell, J. B., Day, M. S., Rendleman, C. A., Woosley, S. E., & Zingale, M. **Direct numerical simulations of Type Ia supernovae flames. I. The Landau–Darrieus instability**. *The Astrophysical Journal*, v. 606, n. 2, p. 1029–1038, 2004.

Böttler, H., Lulic, H., Steinhausen, M., Wen, X., Hasse, C., & Scholtissek, A. **Flamelet modeling of thermo-diffusively unstable hydrogen-air flames**. arXiv preprint, arXiv:2301.06780, 2023.

Brouillette, M. The Richtmyer–Meshkov instability. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 34, p. 445–468, 2002.

Carrier, G., Fendell, F., Chen, K., & Cook, S. **Evaluating a simple model for laminar-flame-propagation rates. II. spherical geometry.** *Combustion Science and Technology*, v. 79, p. 229-245, 1991.

Chen, P., Li, Y., Huang, F., Guo, S., & Liu, X. **Experimental and LES investigation of premixed methane/air flame propagating in a chamber for three obstacle BR configurations.** *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 41, p. 48-54, 2016.

Ciccarelli, G., & Dorofeev, S. **Flame acceleration and transition to detonation in ducts.** *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 34, p. 499-550, 2008.

Cross, M., & Ciccarelli, G. **DDT and detonation propagation limits in an obstacle filled tube.** *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 36, p. 380-386, 2015.

Emami, S., Mazaheri, K., Shamooni, A., & Mahmoudi, Y. **LES of flame acceleration and DDT in hydrogen-air mixture using artificially thickened flame approach and detailed chemical kinetics.** *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 40, p. 7395-7408, 2015.

Gaathaug, A. V., Vaagsaether, K., & Bjerketvedt, D. **Experimental and numerical investigation of DDT in hydrogen-air behind a single obstacle.** *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 37, p. 17606-17615, 2012.

Gamezo, V. N., Ogawa, T., & Oran, E. S. **Numerical simulations of flame propagation and DDT in obstructed channels filled with hydrogen-air mixture.** *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 31, p. 2463-2471, 2007.

Gamezo, V. N., Ogawa, T., & Oran, E. S. **Flame acceleration and DDT in channels with obstacles: Effect of obstacle spacing.** *Combustion and Flame*, v. 155, p. 302-315, 2008.

Gelfand, B. E., Silnikov, M. V., Medvedev, S. P., & Khomik, S. V. **Thermo-Gas Dynamics of Hydrogen Combustion and Explosion**. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2012.

Glimm, J., Grove, J. W., Li, X. L., Shyue, K.-M., Zeng, Y., & Zhang, Q. **Three-dimensional front tracking**. *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 19, n. 3, p. 703–727, 1998.

Goodwin, G. B., Houim, R. W., & Oran, E. S. **Effect of decreasing blockage ratio on DDT in small channels with obstacles**. *Combustion and Flame*, v. 173, p. 16-26, 2016.

Heidari, A., & Wen, J. X. **Flame acceleration and transition from deflagration to detonation in hydrogen explosions**. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 39, p. 6184-6200, 2014. doi:10.1016/j.ijhydene.2014.01.168

Jiang, Y., Gao, W., Sun, Z., Liang, B., Zhang, K., & Li, Y. **Experimental and numerical study on explosion behavior of hydrogen-air mixture in an obstructed closed chamber**. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 49, p. 1032-1045, 2024.

Johansen, C., & Ciccarelli, G. **Numerical simulations of the flow field ahead of an accelerating flame in an obstructed channel**. *Combustion Theory and Modelling*, v. 14, n. 2, p. 235-255, 2010.

Karanam, A., Sharma, P. K., & Ganju, S. **Numerical simulation and validation of flame acceleration and DDT in hydrogen air mixtures**. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 43, p. 17492-17504, 2018.

Khodadadi Azadboni, R., Wen, J. X., Heidari, A., & Wang, C. **Numerical modeling of deflagration to detonation transition in inhomogeneous hydrogen/air mixtures**. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 49, p. 722–730, 2017.

Law, C. K. **Combustion Physics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2006.

Lee, J. H. S. **The Detonation Phenomenon**. Cambridge: Cambridge University Press, 2008.

Li, M., Liu, D., Shen, T., Sun, J., & Xiao, H. **Effects of obstacle layout and blockage ratio on flame acceleration and DDT in hydrogen-air mixture in a channel with an array of obstacles**. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 47, p. 5650-5662, 2022.

Li, M., & Xiao, H. **A study of the occurrence of DDT in an array of obstacles: Combined effects of longitudinal and transverse obstacle spacings**. *Fuel*, v. 357, p. 129813, 2024.

Li, X., Dong, J., Jin, K., Duan, Q., Sun, J., Li, M., & Xiao, H. **Flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in a channel with continuous triangular obstacles: Effect of equivalence ratio**. *Process Safety and Environmental Protection*, v. 167, p. 576-591, 2022.

Liu, Z., Li, X., Li, M., & Xiao, H. **Flame acceleration and DDT in a channel with fence-type obstacles: Effect of obstacle shape and arrangement**. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 39, p. 2787-2796, 2023.

Lu, X., Kaplan, C. R., & Oran, E. S. **Predictions of flame acceleration, transition to detonation, and detonation propagation using the Chemical-Diffusive Model**. *Combustion and Flame*, v. 235, p. 111705, 2022.

Matalon, M. **The Darrieus–Landau instability of premixed flames**. *Fluid Dynamics Research*, v. 50, p. 051412, 2018.

Mei, Y., Shuai, J., Zhou, N., Ren, W., & Ren, F. **Flame propagation of premixed hydrogen-air explosions in bend pipes**. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 77, p. 104790, 2022.

Mei, Y., Shuai, J., Li, Y., Zhou, N., Ren, W., & Ren, F. **Flame acceleration process of premixed hydrogen in confined space with different obstacle shapes.** *Fuel*, v. 334, p. 126624, 2023.

Motaghian, S., & Beji, T. **Soot modeling in large eddy simulation of turbulent buoyant flames using the laminar smoke point and the Eddy Dissipation Concept.** *Combustion Science and Technology*, v. 197, p. 1362-1383, 2025.

Moukalled, F., Mangani, L., & Darwish, M. **The finite volume method in computational fluid dynamics: An advanced introduction with OpenFOAM® and Matlab®.** Springer, 2016.

Napieralski, M., Cobos, F., Sánchez-Sanz, M., & Huete, C. **Richtmyer-Meshkov instability when a shock wave encounters with a premixed flame from the burned gas.** *Applied Mathematical Modelling*, v. 134, p. 268–287, 2024.

Nguyen, T., Strebinger, C., Bogin Jr., G. E., & Brune, J. **A 2D CFD model investigation of the impact of obstacles and turbulence model on methane flame propagation.** *Process Safety and Environmental Protection*, v. 146, p. 95-107, 2021.

Pope, S. B. **Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows.** *New Journal of Physics*, v. 6, p. 35, 2004.

Shen, X., Zhang, C., Xiu, G., & Zhu, H. **Evolution of premixed stoichiometric hydrogen/air flame in a closed duct.** *Energy*, v. 176, p. 265-271, 2019.

Sheng, Z., Yang, G., Gao, W., Li, S., Shen, Q., & Sun, H. **Study on the dynamic process of premixed hydrogen-air deflagration flame propagating in a closed space with obstacles.** *Fuel*, v. 334, p. 126542, 2023.

Silvestrini, M., Genova, B., Parisi, G., & Leon Trujillo, F. J. **Flame acceleration and DDT run-up distance for smooth and obstacles filled tubes.** *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 21, p. 555-562, 2008.

Teodorczyk, A., Drobniak, P., & Dabkowski, A. **Fast turbulent deflagration and DDT of hydrogen-air mixtures in small obstructed channel.** *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 34, p. 5887-5893, 2009.

Turns, S. R. **Introdução à combustão: conceitos e aplicações.** 3. ed. Porto Alegre: AMGH Editora, 2013. Tradução: Amir Antônio Martins de Oliveira Júnior.

Versteeg, H. K., & Malalasekera, W. **An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method.** 2nd ed. Pearson Education, 2007.

Wang, J., Zhao, X., Gao, L., Wang, X., & Zhu, Y. **Effect of solid obstacle distribution on flame acceleration and DDT in obstructed channels filled with hydrogen-air mixture.** *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 47, p. 12759-12770, 2022.

Wang, J., Zhao, X., Dimi-Ngolo, J. P., Gao, L., Pan, J., & Zhu, Y. **Effect of fluidic obstacles on flame acceleration and DDT process in a hydrogen-air mixture.** *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 48, p. 14896-14907, 2023.

Wang, S., Xiao, G., Duan, Y., & Mi, H. **Effect of obstacle arrangement on premixed hydrogen flame: Eddy-dissipation concept model based numerical simulation.** *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 48, p. 16445-16456, 2023.

Wang, S., Xiao, G., Mi, H., Feng, Y., & Chen, J. **Experimental and numerical study on flame fusion behavior of premixed hydrogen/methane explosion with two-channel obstacles.** *Fuel*, v. 333, p. 126530, 2023.

Wintenberger, E., & Shepherd, J. E. **Detonation Waves and Pulse Detonation Engines**. Graduate Aeronautical Laboratories, California Institute of Technology, Pasadena, CA. Ae103 Lecture Notes, 27 January 2004

Xiao, H., & Oran, E. S. **Flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in hydrogen-air mixture in a channel with an array of obstacles of different shapes**. *Combustion and Flame*, v. 220, p. 378-393, 2020.

Xiao, H., Li, X., & Sun, J. **Flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in hydrogen-oxygen mixture in a channel with triangular obstacles**. In: International Conference on Hydrogen Safety (ICHS 2021), 9th, Edinburgh (online), 21–24 September 2021. Edinburgh: International Association for Hydrogen Safety (HySafe), 2021.

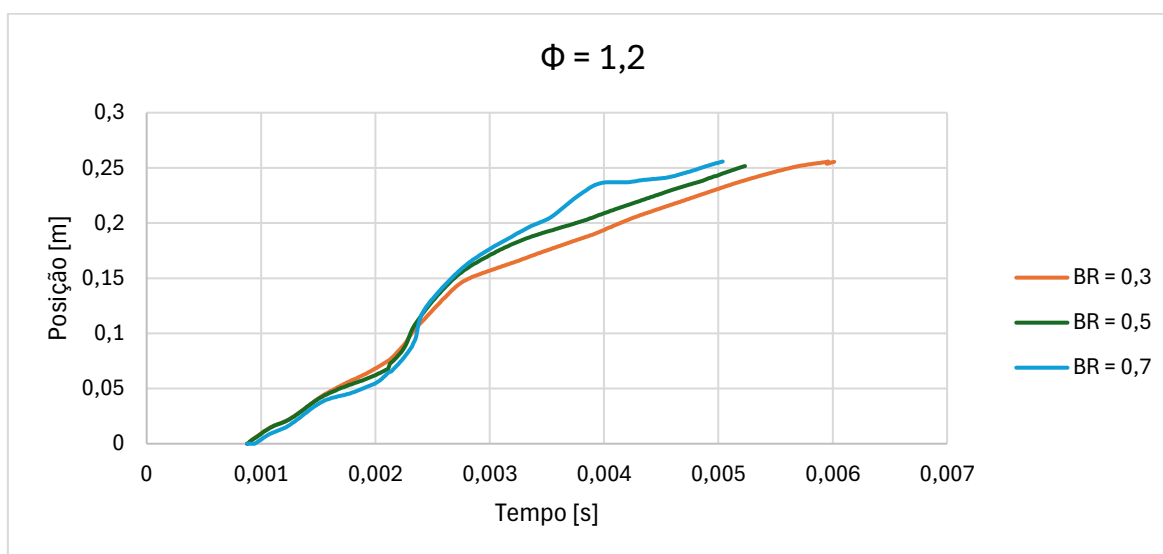
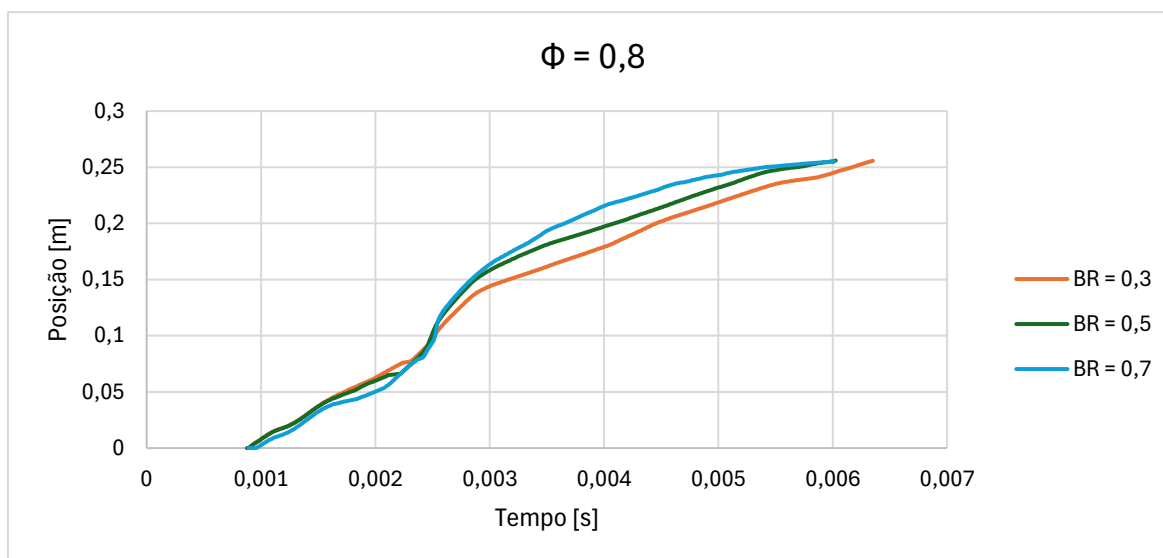
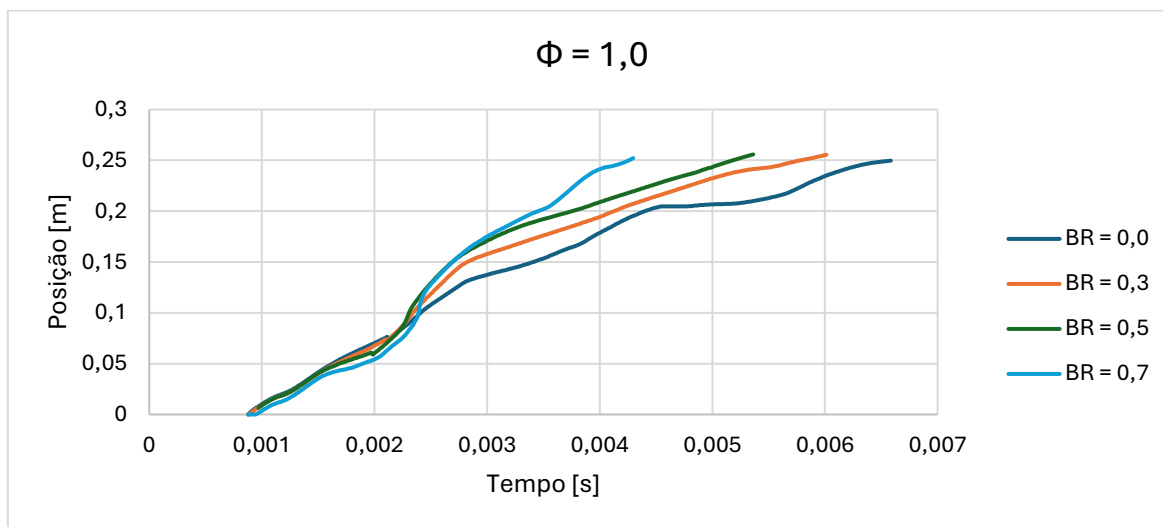
Xiao, H., Sun, J., & Chen, P. **Experimental and numerical study of premixed hydrogen/air flame propagating in a combustion chamber**. *Journal of Hazardous Materials*, v. 268, p. 132-139, 2014.

Xu, Q., Chen, G., Zhang, Q., & Su, S. **Numerical simulation study and dimensional analysis of hydrogen explosion characteristics in a closed rectangular duct with obstacles**. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 47, p. 39288-39301, 2022.

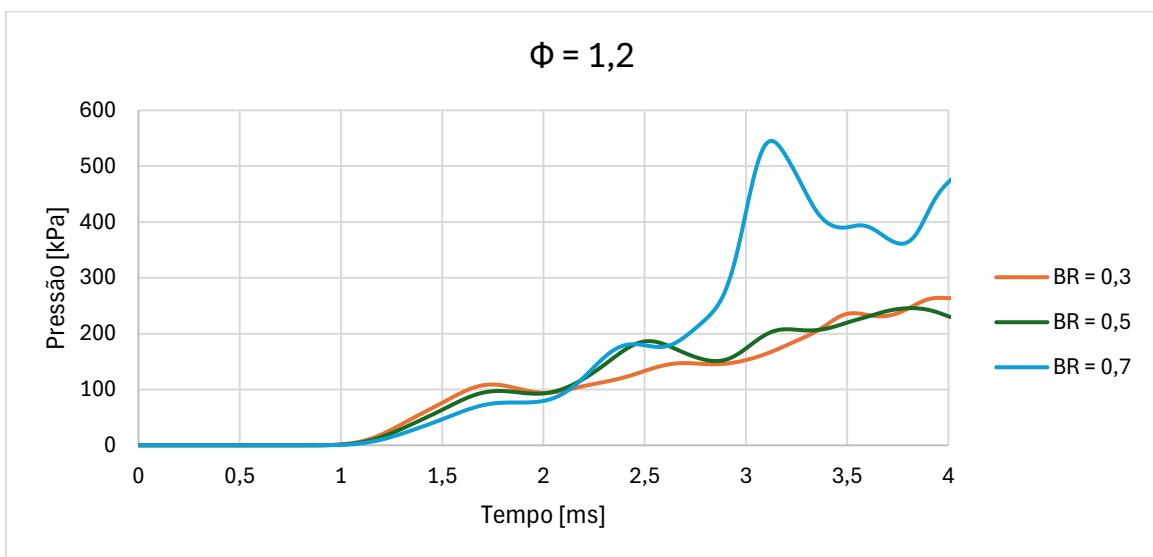
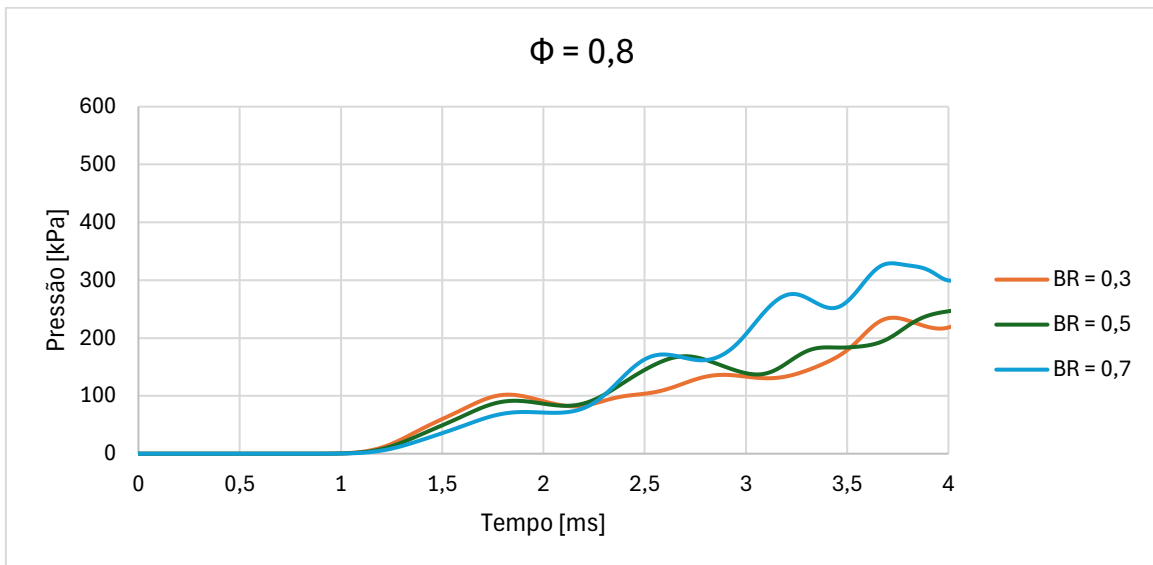
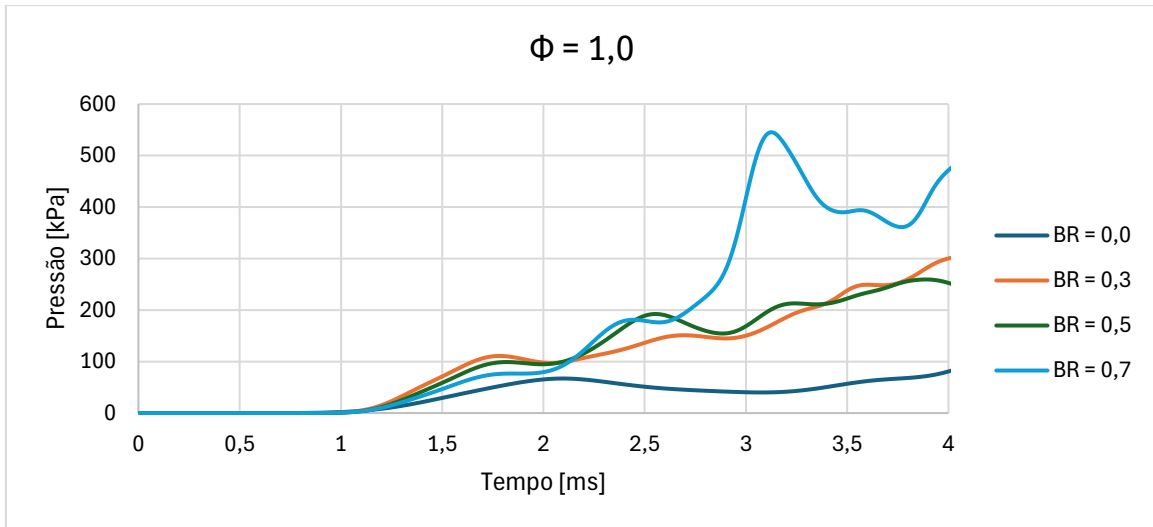
Zhou, Y. **Rayleigh–Taylor and Richtmyer–Meshkov instability induced flow, turbulence, and mixing**. I. *Physics Reports*, v. 720–722, p. 1–136, 2017.

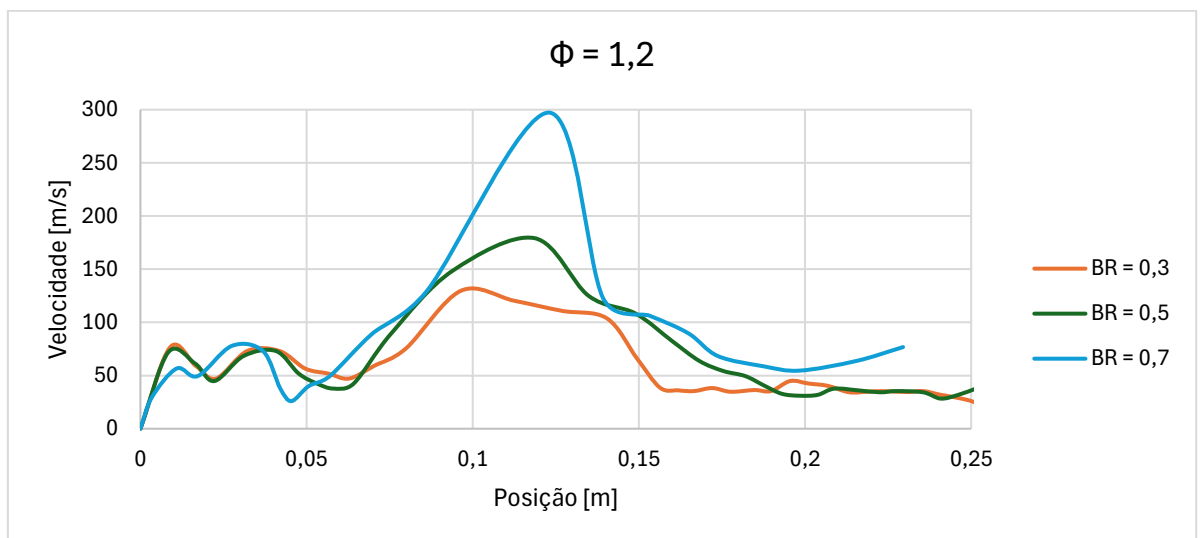
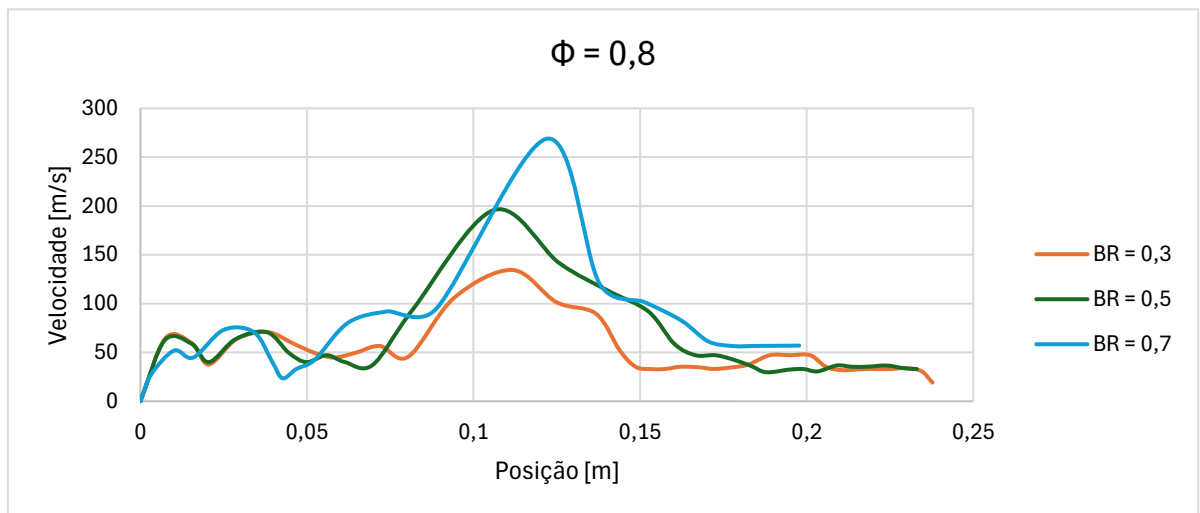
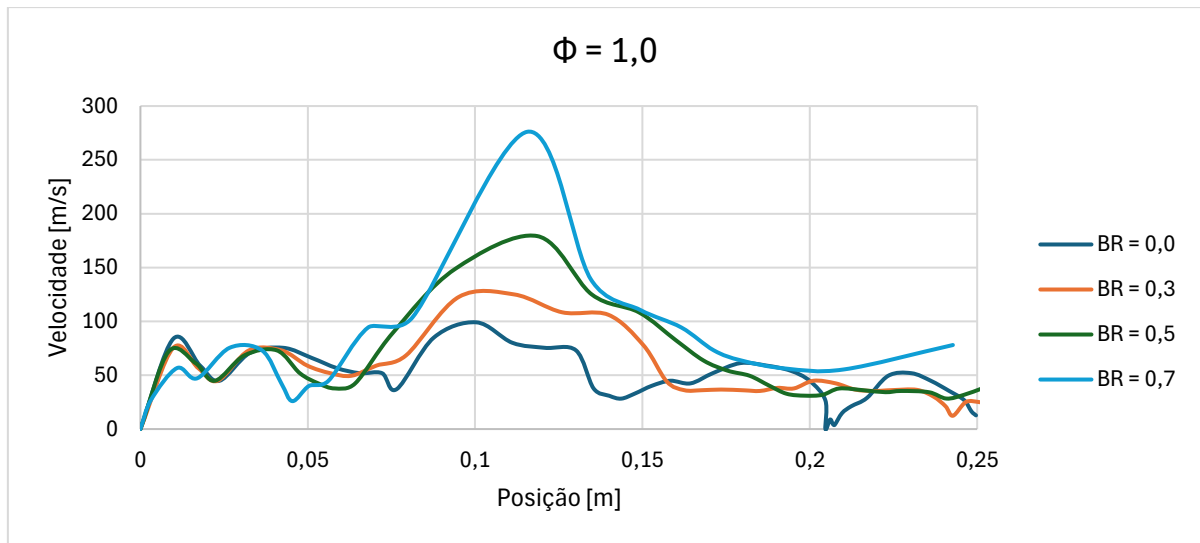
APÊNDICE A – Gráficos para os comportamentos simulados

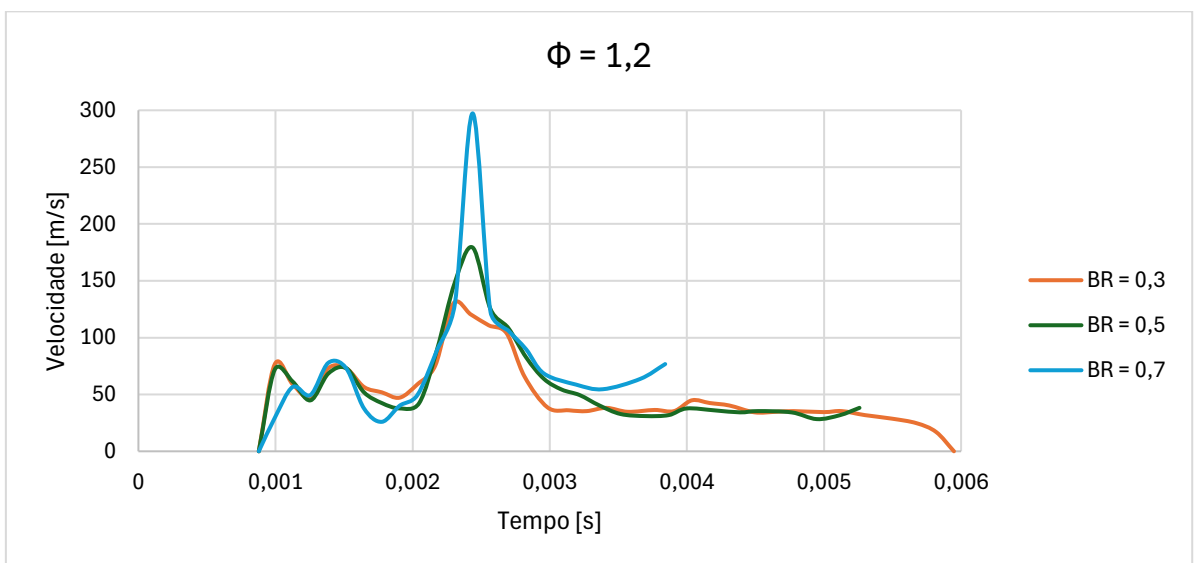
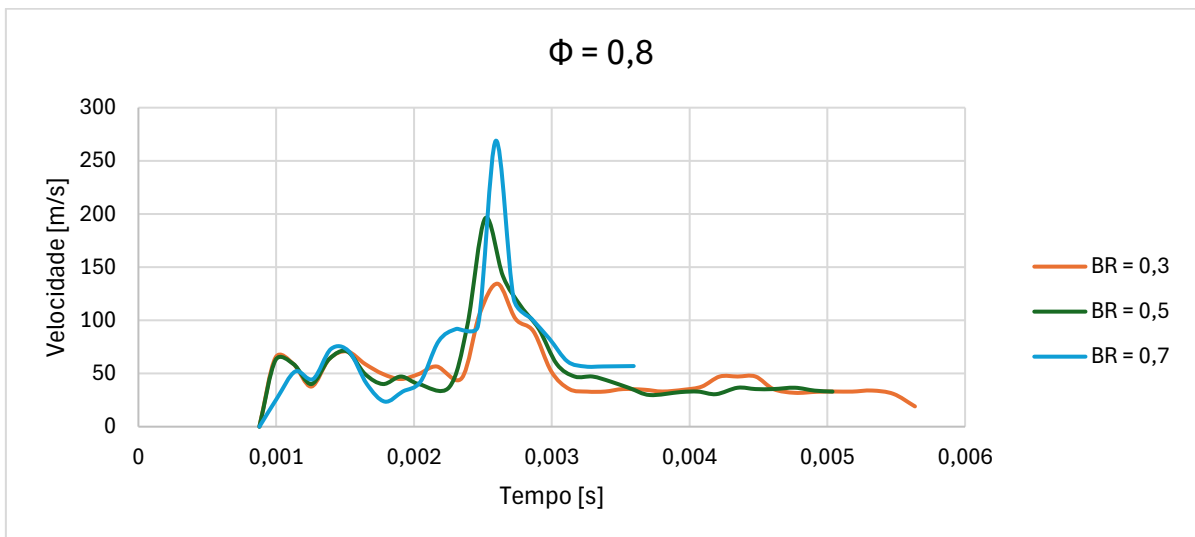
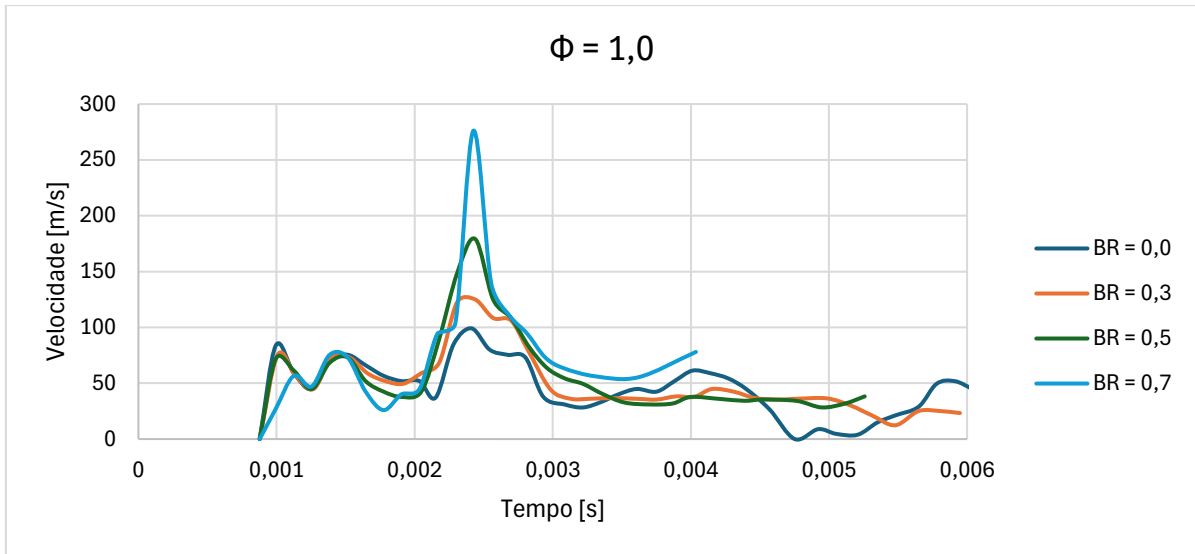
A.1 Figuras – Posição pelo tempo da frente de chama para diferentes razões de bloqueio



A.2 Figuras – Pressão pelo tempo para diferentes razões de bloqueio



A.3 Figuras – Velocidade pela posição para diferentes razões de bloqueio

A.4 Figuras – Velocidade pelo tempo para diferentes razões de bloqueio

APÊNDICE B – Guia de referências

Referência	Software utilizado	Validação experimental	Modelo de turbulência	Dimensionalidade	Espécies investigadas	Seção transversal	Temperatura máxima [K]	Razão de bloqueio
Nguyen et al., 2021	ANSYS Fluent	-	RANS e LES	2D	(CH ₄)-ar	Retangular	2300	0,41 e 0,55
Wang, S. et al., 2023a	ANSYS Fluent	-	RNG k-e	2D	(H ₂)-ar	Retangular	-	0,5
Chen et al., 2016	ANSYS Fluent	Sim	LES	3D	(CH ₄)-ar	Retangular	-	0,3; 0,5 e 0,7
Jiang et al., 2024	ANSYS Fluent	Sim	LES	3D	(H ₂)-ar	Retangular	-	0,3; 0,5 e 0,7
Wang, S. et al., 2023b	ANSYS Fluent	Sim	RNG k-e	2D	(CH ₄)-(H ₂)	Retangular	-	0,375; 0,5625 e 0,75
Mei et al., 2023	ANSYS Fluent	-	LES	3D	(H ₂)-ar	Retangular	-	0,2; 0,4; 0,6 e 0,8
Mei et al., 2022	ANSYS Fluent	Sim	LES	3D	(H ₂)-ar	Cilíndrica	-	-
Xu et al., 2022	ANSYS Fluent	-	SAS	2D	(H ₂)-ar	Retangular	2800	0,5
Johansen e Ciccarelli, 2010	ANSYS Fluent	-	LES	2D /3D	(CH ₄)-ar	Retangular	-	0,33; 0,5 e 0,67
Sheng et al., 2023	ANSYS Fluent	-	LES	3D	(H ₂)-ar	Retangular	-	0,5
Wang et al., 2022a	OpenFOAM	-	SST k-w	2D	(H ₂)-ar	Retangular	2450	0,6
Wang et al., 2023	OpenFOAM	-	SST k-w	2D	(H ₂)-ar	Retangular	-	0,11 a 0,42
Wang et al., 2022b	OpenFOAM	-	SST k-w	2D	(H ₂)-ar	Retangular	2450	0,6
Emami et al., 2015	OpenFOAM	-	LES	2D	(H ₂)-ar	Retangular	2136	0,5
Karanam et al., 2018	OpenFOAM	-	SST k-w	2D	(H ₂)-ar	Retangular	2136	0,3 e 0,6
Gaathaug et al., 2012	FLIC	Sim	k	2D	(H ₂)-ar	Retangular	-	0,5; 0,75; 0,84 e 0,9
Li e Xiao, 2023	WENO	-	-	2D	(H ₂)-ar	Retangular	2378.4	0,5
Goodwin et al., 2016	Não especificado	-	-	2D/3D	(C ₂ H ₄)-(O ₂)	Retangular	4635	0,05; 0,1; 0,35; 0,5 e 0,8
Li et al., 2022	Não especificado	-	-	2D	(H ₂)-ar	Retangular	2378	0,33; 0,5 e 0,67
Liu et al., 2023	Não especificado	Sim	-	2D	(H ₂)-(O ₂)	Retangular	3074.38	0,25; 0,5; 0,75; 0,84 e 0,9

Xiao e Oran, 2020	Não especificado	-	N-S	2D	(H ₂)-ar	Retangular	2136	0,5
Gamezo et al., 2007	Não especificado	-	N-S	2D/3D	(H ₂)-ar	Retangular	2637	0,5
Lu et al., 2022	Não especificado	-	k-e e LES	2D	(H ₂)-ar	Retangular	2748	0,5
Liu et al., 2023	Não especificado	-	k-e e LES	2D	(H ₂)-(O ₂)	Retangular	3074.38	0,25; 0,50; 0,75 e 0,90
Gamezo et al., 2008	Não especificado	-	N-S	2D	(H ₂)-ar	Retangular	2367	0,5
Shen et al., 2019	N/A	Sim	-	-	(H ₂)-ar	Retangular	-	-
Teodorczyk et al., 2009	N/A	Sim	-	-	(H ₂)-ar	Retangular	2378.4	0,25; 0,5 e 0,75
Silvestrini et al., 2008	N/A	Sim	-	-	(H ₂)-(C ₂ H ₄)- (CH ₄)-(C ₃ H ₈)-ar	Cilíndrica	2378	0,02; 0,04; 0,09; 0,3; 0,45 e 0,59
Li et al., 2022	N/A	Sim	-	-	(H ₂)-(O ₂)	Retangular	3074.38	0,3
Cross e Ciccarelli, 2015	N/A	Sim	-	-	(H ₂)-(C ₂ H ₄)-ar	Cilíndrica	2378	0,44

APÊNDICE C – Setup utilizado no ANSYS Fluent

