UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA INSTITUTO DE FÍSICA

MODELAMENTO DA PROPAGAÇÃO SUPERFICIAL DE FRENTES DE FOGO COM A EQUAÇÃO KPZ

ANDRÉ TELLES CAMPOS

ORIENTADOR: TARCÍSIO MARCIANO DA ROCHA FILHO

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO EM FÍSICA

BRASÍLIA/DF: FEVEREIRO - 2009.

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA INSTITUTO DE FÍSICA

MODELAMENTO DA PROPAGAÇÃO SUPERFICIAL DE FRENTES DE FOGO COM A EQUAÇÃO KPZ

Por ANDRÉ TELLES CAMPOS

Dissertação de Mestrado submetida ao Instituto de Física da Universidade de Brasília, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de mestre em FÍSICA.

Aprovada por:

Prof. Dr. Tarcísio Marciano da Rocha Filho (IF-UnB) (Orientador)

Prof. Dr. Annibal Dias de Figueiredo Neto (IF-UnB) (Examinador Interno)

Dr. George Cajaty Barbosa Braga (CBMDF) (Examinador Externo)

Prof. Dr. Marco Antônio Amato (IF-UnB) (Suplente)

Brasília/DF, 27 DE FEVEREIRO DE 2009.

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho aos meus filhos, Luís Felipe e Luiza, e à minha esposa, Karina, que tanto me fortalecem.

AGRADECIMENTOS

Sou grato primeiramente a Deus, por ter me dado forças para superar os obstáculos do caminho. Presto reconhecimento especial à minha família, que soube compreender os momentos de ausência e ainda incentivar-me a continuar na empreitada. Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Tarcísio Marciano, pelo empenho e confiança. Finalmente, deixo meu muito obrigado aos amigos e amigas que colaboraram com idéias e estímulo à pesquisa e ainda ao CBMDF por ter concedido tal oportunidade.

RESUMO

Esta dissertação trata do problema de crescimento de interfaces em superfícies, especificamente da propagação superficial de frentes de fogo e de sua modelagem por equações diferenciais estocásticas. Nesta dissertação apresentamos uma nova abordagem para modelar o crescimento superficial de frentes de fogo usando a equação KPZ. Nosso método encontra os parâmetros da equação KPZ a partir de poucas frentes de fogo, o que representa vantagem com relação a outros métodos inversos, podendo ser aplicada em casos reais de queimadas. O ajuste da equação KPZ elaborado tem condições de ser aplicado para melhorar a prevenção e a perícia de incêndios.

ABSTRACT

The present work addresses the problem of interfaces growth, specifically the surface spread of fire fronts and its description using stochastic differential equations. This dissertation presents a new approach for modeling the surface growth of the fire fronts using the KPZ equation. Our method obtains the parameters of the KPZ equation from a few fronts of fire, which is an improvement compared to other inverse methods and can be applied to real fires. Our work can be applied to improve the fire prevention and investigation.

Sumário

1	INTRODUÇÃO											
	1.1	CONSIDERAÇÕES INICIAIS	1									
	1.2	ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	2									
2 CRESCIMENTO DE INTERFACES												
	2.1	PROCESSOS ESTOCÁSTICOS	4									
	2.2	PROBLEMAS DE INTERFACE NA NATUREZA	5									
	2.3	DINÂMICA DE CRESCIMENTO DE INTERFACES	6									
	2.4	EQUAÇÃO KPZ	8									
	2.5	EXPOENTES DE ESCALA	.1									
	2.6	CRESCIMENTO DE INTERFACES EM MEIOS ALEATÓRIOS 12										
	2.7	SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO KPZ 1	3									
	2.8	MODELAGEM DA EQUAÇÃO KPZ	4									
		2.8.1 Método inverso	.5									
		2.8.2 Uma abordagem modificada	.7									
3	DIN	ÂMICA DE INCÊNDIOS 1	9									
0	3.1	INTRODUÇÃO 1	9									
3.2 FOGO E SEU CRESCIMENTO												
	0.2	3.2.1 Jonicão 2	22									
		3.2.2 Propagação de chamas	26									
		323 Taya de queima	20									
		3.2.4 Transforância de calor	,0 ₹3									
	22	$3.2.4 \text{ Transferencia de Calor} \dots \dots$).) 2.4									
	ე.ე	2.2.1 Métodos probabilísticos)4)5									
		2.2.2 Métodos probabilisticos										
		3.3.2 Metodos deterministicos	90									
4	RE	ULTADOS E DISCUSSÃO 4	:0									
5	CO	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS										
	5.1	CONCLUSÕES	17									

5.2	PERSPECTIVAS PARA PESQUISAS FUTURAS	47
REFE	RÊNCIAS	49

Lista de Tabelas

3.1	Calor requerido para produzir voláteis	32
4.1	Resultados obtidos para o ajuste da equação KPZ	46

Lista de Figuras

2.1	Origem do termo não-linear da equação KPZ	10
3.1	Limites de inflamabilidade	23
3.2	Comportamento da ignição de acordo com a taxa de aquecimento do	
	material	25
3.3	Modos de propagação de chamas	26
3.4	Influência da inclinação da superfície na taxa de propagação de chamas	28
4.1	Evolução da frente de fogo no simulador FDS	41
4.2	Evolução do perfil de temperatura do material incendiado no simulador	
	FDS	41
4.3	Domínio computacional da amostra de espuma mostrando a malha numérica	a
	para resolução de 64 células no eixo x	42
4.4	Domínio computacional da amostra de espuma em relação aos eixos	
	coordenados	44
4.5	Ajuste da equação KPZ para malha de 32 células	44
4.6	Ajuste da equação KPZ para malha de 64 células	44
4.7	Ajuste da equação KPZ para malha de 32 células com queimador linear	
	e poucas interfaces para o ajuste.	45
4.8	Ajuste da equação KPZ para malha de 64 células com queimador linear	
	e poucas interfaces para o ajuste.	45
4.9	Ajuste da equação KPZ para malha de 80 células com queimador linear	
	e poucas interfaces para o ajuste.	45
4.10	Ajuste da equação KPZ para diferentes malhas numéricas	46

Capítulo 1 INTRODUÇÃO

1.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS

O problema de crescimento de interfaces está relacionado com diversos modelos do dia-a-dia, como o crescimento de fumaça, agregados colóides, frentes de chama, tumores e outros. Parte desses fenômenos ocorre em superfícies. No presente trabalho estamos interessados na propagação superficial de frentes de fogo. Ou seja, como descrever a evolução temporal da fronteira entre o material queimado e o ainda não queimado. O fogo muitas vezes se propaga em meios inomogêneos, o que é uma dificuldade adicional.

Uma ferramenta para compreender o comportamento de vários processos de crescimento são as equações diferenciais estocásticas. Tais equações descrevem a interface em escalas de comprimento grandes, ou seja, negligenciam detalhes de escala de comprimento pequeno e focam somente nas propriedades assintóticas de grão-grosso. Desse modo, a escolha da forma da equação e a determinação de parâmetros relevantes pode permitir uma boa descrição do padrão de crescimento, ou propagação, numa escala que modele os detalhes finos como parte do processo estocástico subjacente. Uma vez obtida a equação estocástica, podemos resolvê-la utilizando métodos numéricos disponíveis.

Como vamos estudar a propagação do fogo, devemos compreender os mecanismos físicos e químicos envolvidos. Para que o fogo ocorra e se mantenha quatro elementos devem estar presentes: *combustível, comburente, agente ígneo* e *reação em cadeia.* O estudo quantitaivo do desenvolvimento do incêndio dá-se pela investigação da *ignição*, da *propagação de chamas* e da *taxa de queima*. A ignição informa quando o fogo começa a crescer. A propagação das chamas permite definir as fronteiras da área queimada e a taxa de queima fornece a quantidade de energia liberada nessa região.

Existem alguns algoritimos computacionais para modelar o comportamento do fogo. Os modelos que retratam mais fielmente a complexidade do fenômeno são os métodos determinísticos, que usam a Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC) [1]. Nesta dissertação apresentamos uma abordagem para modelar o crescimento superficial de frentes de fogo usando a equação de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) [2]. As predições do simulador de dinâmica de incêndios baseado em DFC, denominado *Fire Dynamics Simulator* (FDS) [3], são confrontadas com aquelas obtidas a partir do ajuste de reconstrução da equação KPZ que desenvolvemos.

A modelagem do crescimento do fogo representa uma importante ferramenta para a prevenção e a investigação de incêndios. A primeira modelagem da equação KPZ a partir de dados experimentais é creditada a Lam e Sander [4]. Os autores propuseram um método inverso baseado em diferenças finitas para aproximar a dinâmica de crescimento. Uma formulação alternativa adota o método pseudoespectral concebido por Giacometti e Rossi [5], que consiste em aplicar o procedimento de quadrados mínimos para as funções correlação ao invés de diretamente às variáveis estocáticas da interface. Nosso método, fundamentado na reconstrução da equação KPZ, pode mostrar-se mais eficiente, uma vez que necessita de menor tempo e custo computacional para fornecer bons prognósticos acerca da evolução do sinistro. Além disso, a abordagem que desevolvemos apresenta vantagens com relação a outros métodos inversos, podendo ser aplicada em casos reais de queimadas para encontrar os parâmetros da equação KPZ a partir de poucas frentes de fogo.

1.2 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

A presente dissertação está estruturada da seguinte forma. No capítulo 2 tratamos do problema de crescimento de interfaces. Iniciamos com uma breve revisão de processos estocásticos, passando, então, ao estudo da dinâmica de crescimento de interfaces. Chegamos à formulação da equação KPZ e ao estudo de suas propriedades. Finalizamos o capítulo discutindo métodos de solução numérica e modelagem da equação KPZ, incluindo a apresentação da abordagem desenvolvida para esta pesquisa.

Como utilizamos a equação KPZ para modelar o fenômeno de propagação de frentes de fogo, trataremos no capítulo 3 dos aspectos relacionados à dinâmica de incêndios. A caracterização quantitativa do fogo é obtida por meio do estudo da ignição, da propagação de chamas e da taxa de queima. Abordamos também as formas de transferência de calor para entender como os incêndios se propagam. Por fim, o modelamento computacional do fogo é discutido.

No capítulo 4 são apresentados os resultados da modelagem da equação KPZ aplicada ao crescimento de frentes de fogo em superfícies combustíveis a partir de dados obtidos por simulação no FDS. Encerramos o texto com as conclusões e perspectivas de estudos futuros seguindo a atual linha de pesquisa.

Capítulo 2 CRESCIMENTO DE INTERFACES

2.1 PROCESSOS ESTOCÁSTICOS

Muitos fenômenos de interesse em Física têm uma dependência temporal extremamente complicada, apresentando, porém, algumas características médias que podem ser observadas e que obedecem a leis simples [6]. Os processos estocásticos são um exemplo importante de tais fenômenos e constituem atualmente uma área de grande interesse na Física.

Um processo estocástico é definido a partir do conceito de variável estocástica (X), que consiste em especificar:

- O conjunto de valores possíveis (intervalo, conjunto de estados, espaço de amostragem, espaço de fase).
- A distribuição de probabilidade sobre esse conjunto.

O conjunto de valores pode ser discreto, contínuo ou parcialmente discreto e parcialmente contínuo. A distribuição de probabilidade é dada por uma função nãonegativa $P(x) \ge 0$ e normalizada $\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)dx = 1$. A probabilidade que X assuma valores entre $x \in x + dx$ é P(x)dx. No caso de uma variável contínua P(x) é denominada uma densidade de probabilidade.

Uma vez definida uma variável aleatória, podemos definir todas as quantidades Y que são função de X por algum mapeamento f. Essas quantidades Y podem ser qualquer objeto matemático, em especial, funções de uma variável adicional t:

$$Y_X(t) = f(X, t).$$
 (2.1)

A equação (2.1) define um processo estocástico quando t é uma variável temporal. Desse modo, um processo estocástico é simplesmente uma função de duas variáveis, sendo uma o tempo e a outra, uma variável estocástica. A realização do processo é obtida quando X assume um de seus possíveis valores: $Y_x(t) = f(x, t)$, que é uma função amostra. As médias são formadas com base nas densidades de probabilidade das variáveis aleatórias:

$$\langle Y(t)\rangle = \int Y_x(t)P_X(x)dx.$$
 (2.2)

Um processo estocástico é dito estacionário quando os momentos não são afetados por um deslocamento no tempo, isto é,

$$\langle Y(t_1 + \tau) \cdots Y(t_n + \tau) \rangle = \langle Y(t_1) \cdots Y(t_n) \rangle.$$
(2.3)

2.2 PROBLEMAS DE INTERFACE NA NATUREZA

Existem muitos problemas interessantes relacionados com o crescimento de interfaces. Foram propostos diversos modelos para descrever o crescimento de fumaça, agregados colóides, frentes de chama, tumores, dentre outros exemplos [2]. A maior parte desses fenômenos ocorre em superfícies. Uma superfície aparentemente lisa à distância pode se revelar rugosa ao microscópio. Como descrever a morfologia de tais superfícies é uma questão a ser respondida por meio de conceitos relacionados à sua rugosidade.

Um exemplo familiar de crescimento de interfaces é o escoamento de fluidos em meios porosos. A colocação da borda de uma folha de papel toalha num recipiente com um fluido permite verificar como a interface cresce. O papel é um meio material inomogêneo, que serve de protótipo para rochas porosas contendo petróleo. Uma diferença entre esses dois tipos de escoamento é a escala dos comprimentos nos quais esses fenômenos ocorrem [7]. Outro exemplo, que vai interessar particularmente nesta dissertação, é a propagação superficial de frentes de fogo. Tomemos o caso de uma folha de papel na horizontal, queimada a partir de uma extremidade da folha. Podemos observar como a fronteira entre o material queimado e o não queimado evolui. O padrão de crescimento desse fenômeno é muito similar a outros encontrados na natureza, como o escoamento de fluidos citado mais acima.

Uma ferramenta útil para o estudo de processos de crescimento são as equações diferenciais estocásticas. Tais equações descrevem a interface em escalas de comprimento grandes, ou seja, negligenciam detalhes de escala de comprimento pequeno e focam somente nas propriedades assintóticas de grão-grosso.

Uma tarefa inicial na investigação de um novo problema de interface é tentar deduzir uma equação de crescimento contínua. Se já houver um modelo discreto para o sistema, deve-se ser capaz de derivar uma equação contínua correspondente a esse modelo. Um método alternativo de derivar a equação de crescimento é explorar princípios de simetria.

Uma vez que se tenha obtido uma equação de crescimento deve-se encontrar suas predições, determinando, por exemplo, os expoentes de escala e as funções de escala. Em geral, não é possível obter soluções exatas, portanto, é necessário aplicar várias aproximações para desnudar o comportamento de escala. Uma ferramenta especialmente útil é o método do grupo de renormalização.

2.3 DINÂMICA DE CRESCIMENTO DE INTERFACES

A formação de interfaces é influenciada por um grande número de fatores e é quase impossível distinguir todos. No entanto, espera-se que uma pequena quantidade de leis básicas determinem a morfologia e a dinâmica de crescimento. Existem alguns conceitos de escala úteis para a descrição e resolução de problemas de interfaces. Um conceito inicial é o da altura média da superfície $(\langle h \rangle)$:

$$\langle h(t) \rangle \equiv \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L} h_i(t).$$
(2.4)

Onde $h_i(t)$ é a altura da célula *i* no tempo *t* e *L* é o número de colunas da malha, que dá o tamanho do sistema.

Em certas condições a altura média da superfície cresce linearmente com o tempo, isto é, $\langle h \rangle \propto t$.

A largura da interface, w, que caracteriza a rugosidade da interface, é definida como sendo a flutuação quadrática média da altura:

$$w(L,t) \equiv \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L} [h_i(t) - \langle h(t) \rangle]^2}.$$
 (2.5)

O crescimento pode começar, por exemplo, a partir de uma linha horizontal, ou seja, no tempo zero a interface é uma linha reta com largura zero e, conforme o tempo passa, ela vai se enrugando [7].

Um gráfico típico da evolução temporal da largura tem duas regiões bem definidas cuja fronteira é o tempo de cruzamento (t_{\times}) . Inicialmente, a largura aumenta com uma potência do tempo.

$$w(L,t) \propto t^{\beta}$$
 , $t \ll t_{\times}$ (2.6)

 β é o expoente de crescimento, que caracteriza a dinâmica dependente do tempo do processo de enrugamento.

Depois do tempo de cruzamento, segue-se uma região de saturação, durante a qual a largura atinge um valor de saturação, w_{sat} . Quando L aumenta, w_{sat} também aumenta conforme uma lei de potência:

$$w_{sat}(L) \propto L^{\alpha} \qquad , \qquad t >> t_{\times}$$
 (2.7)

 α é o segundo expoente crítico ou de escala, chamado de expoente de rugosidade, que caracteriza a rugosidade da interface saturada.

O próprio tempo de cruzamento obedece a uma lei de potência, que depende do tamanho do sistema:

$$t_{\times} \propto L^z. \tag{2.8}$$

Onde z é o expoente dinâmico.

Os expoentes críticos α , β e z não são independentes. Aproximando t de t_{\times} pela esquerda na equação (2.6), temos que $w(t_{\times}) \propto t_{\times}^{\beta}$. No entanto, se a aproximação for feita pela direita, obtem-se na equação (2.7) que $w(t_{\times}) \propto L^{\alpha}$. Usando a equação (2.8), chega-se a:

$$z = \frac{\alpha}{\beta}.\tag{2.9}$$

Essa é uma lei de escala válida para qualquer processo de crescimento que obedeça à relação de escala de *Family-Vicsek*:

$$w(L,t) \propto L^{\alpha} f(\frac{t}{L^z}).$$
 (2.10)

Onde f(u) é uma função de escala.

O fenômeno de saturação constitui um efeito de finitude do sistema e está relacionado com a existência de correlações. Desse modo, pode-se definir um comprimento de correlação (ξ), que é uma medida da memória espacial do sistema [8].

2.4 EQUAÇÃO KPZ

Guiados por idéias de universalidade, Kardar, Parisi e Zhang [2] propuseram um modelo para descrever a evolução temporal do perfil de uma interface. Eles escreveram a mais simples equação diferencial estocástica não-linear aplicável ao problema de crescimento, conhecida como *equação KPZ*.

Embora não seja possível deduzir formalmente a equação KPZ, é possível desenvolver um conjunto de argumentos de simetria que levam à teoria linear e depois usar princípios físicos para acrescentar o termo não linear. O guia é que a equação de movimento seja a mais simples possível e compatível com as simetrias do problema. Então, propõe-se a seguinte equação geral:

$$\frac{\partial h(\vec{x},t)}{\partial t} = G(h,\vec{x},t) + \eta(\vec{x},t).$$
(2.11)

Onde G é uma função geral e η é um termo de ruído.

A primeira simetria do problema é a *invariância sob translação temporal*, ou seja, $t \to t + \delta t$. Isso exclui uma dependência explícita de t em G.

Também exige-se a *invariância sob translação na direção de crescimento*, isto é, $h \to h + \delta h$. Assim exclui-se a dependência explícita de h em G, de modo que a equação seja construída a partir de combinações de $\nabla h, \nabla^2 h, \dots, \nabla^n h$.

Outra simetria desejada é a *invariância sob translação na direção perpen*dicular ao crescimento, $\vec{x} \to \vec{x} + \delta \vec{x}$. Portanto, elimina-se a dependência explícita de \vec{x} em G.

Existe também a simetria por rotação e inversão em torno da direção de crescimento. Isso exclui derivadas ímpares, tais como $\nabla h, \nabla(\nabla^2 h)$ e ordens superiores.

Considerando tais simetrias e interface em equilíbrio, que dá origem à simetria acima/abaixo $(h \rightarrow -h)$, chega-se à equação de Edwards-Wilkinson [EW], que é a mais simples equação para descrever as flutuações de uma interface em equilíbrio:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \eta. \tag{2.12}$$

A simetria acima/abaixo pode ser quebrada por uma força aplicada perpendicularmente à interface, que seleciona uma direção particular de crescimento para a interface. Além disso, o crescimento lateral implica usualmente na presença de nãolinearidades. Para justificar a adição de um termo não-linear à equação (2.12), considere o modelo de deposição balística [7] acrescentando uma partícula sobre a superfície em intervalos fixos de tempo e em posições aleatórias. A velocidade de crescimento vocorre localmente normal à interface, gerando um aumento δh ao longo do eixo h (vide figura 2.1).

Assim, pelo teorema de Pitágoras:

$$\delta h = \sqrt{(v\delta t)^2 + (v\delta t\nabla h)^2} = v\delta t \sqrt{1 + (\nabla h)^2}$$



Figura 2.1: Indicação de como ocorre o crescimento localmente ao longo da normal à interface [7], dando origem ao termo-não linear da equação KPZ a partir de perfis sucessivos de um processo de crescimento seguindo a equação (2.15).

Se $|\nabla h| \ll 1$, então podemos expandir da seguinte forma:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = v + \frac{v}{2} (\nabla h)^2 + \cdots$$

Sugerindo que um termo não-linear proporcional a $(\nabla h)^2$ deve estar presente na equação de crescimento, para refletir a situação em que o crescimento lateral é permitido. Adicionando esse termo não-linear à equação (2.12), obtemos a chamada equação Kardar-Parisi-Zhang (KPZ):

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\vec{x}, t).$$
(2.13)

O primeiro termo do lado direito descreve a relaxação da interface devida à tensão superficial ν . O segundo termo é o termo não-linear de mais baixa ordem que pode aparecer na equação de crescimento da interface. O ruído $\eta(\vec{x}, t)$ tem uma distribuição Gaussiana com média nula $(\langle \eta(\vec{x}, t) \rangle = 0)$ e é descorrelacionado espacial e temporalmente:

$$\langle \eta(\vec{x}, t)\eta(\vec{x}', t') \rangle = 2D\delta^d(\vec{x} - \vec{x}')\delta(t - t').$$
 (2.14)

Pode existir também um termo de velocidade inicial, que é removido com a escolha apropriada de um sistema de coordenadas em movimento. Desse modo, a equação KPZ é escrita como:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = c + \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\vec{x}, t).$$
(2.15)

2.5 EXPOENTES DE ESCALA

A equação (2.13) pode ser mapeada em outras formas conhecidas, tais como a equação de Burgers com ruído para um campo de velocidades sem vórtices $(\nabla \times \vec{v})$, por meio da transformação $\vec{v} = -\nabla h$:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \lambda \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} = \nu \nabla^2 \vec{v} - \nabla \eta(\vec{x}, t).$$
(2.16)

Onde \vec{v} é a velocidade do fluido, ν é a viscosidade e $\nabla \eta$ é uma força aleatória. Observamos dessa maneira uma conexão entre a Hidrodinâmica e padrões de crescimento. Isso induz ao uso do formalismo grupo de renormalização para o estudo da escala de flutuações dependentes do tempo, uma vez que já fora aplicado por Foster, Nelson e Stephen [9] para o caso da equação (2.16) com sucesso. O método do grupo de renormalização é uma ferramenta poderosa de cálculo em Mecânica Estatística. A transformação do Grupo de Renormalização (GR) consiste na operação de grão-grosso (*coarse-graining*) seguida pela transformação de escala (*rescaling*)[8].

Em decorrência da natureza irreversível do processo de crescimento, o sistema não está em equilíbrio. Desse modo, para aplicar o grupo de renormalização à equação KPZ, o método deve ser generalizado [7]. A idéia é resolver perturbativamente a equação KPZ, a partir do conhecimento da solução para o problema linear. O comportamento dos expoentes críticos ou de escala, conforme definidos na seção (2.3), é, então, desnudado para diferentes dimensões d do sistema.

Para d = 1 encontramos z = 3/2 e $\alpha = 1/2$ como valores exatos em consequência do teorema de dissipação-flutuação e da invariância Galileana. Essa é a dimensão dos casos estudados nesta dissertação. A dimensão d = 2 é a dimensão crítica do modelo. O ponto fixo determinando o comportamento de acoplamento forte não é acessível por teoria da perturbação padrão. Para $d \ge 3$ a constante de acoplamento λ é irrelevante e assintoticamente é esperada uma superfície plana ideal com z = 2.

2.6 CRESCIMENTO DE INTERFACES EM MEIOS ALEATÓRIOS

A equação mais geral descrevendo o movimento de uma interface é a equação KPZ [7]. No entanto, num meio desordenado mais importante do que o ruído térmico, que está sempre presente, é o ruído independente do tempo (quenched) gerado pela própria desordem. Assume-se que esse ruído tenha média nula ($\langle \eta(\vec{x},h) \rangle = 0$) e correlações da forma:

$$\langle \eta(\vec{x},h)\eta(\vec{x}',h')\rangle = \delta^d(\vec{x}-\vec{x}')\Delta(h-h').$$
(2.17)

Num meio não-homogêneo a velocidade da interface é afetada pela aleatoriedade do meio. A resistência do meio à propagação da interface varia de ponto a ponto, dando origem ao ruído independente do tempo. Se a desordem do meio trava o avanço da interface, então dizemos que ela está na fase *pinada*. Por outro lado, se as forças aplicadas superam a resistência do meio, então a interface está na fase *despinada*. A existência de uma transição entre as fases distingue as interfaces em movimento num meio aleatório.

Num meio aleatório a temperatura finita com uma força aplicada F, a equação KPZ se reescreve:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = F + \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\vec{x}, t) + \eta(\vec{x}, h).$$
(2.18)

Na fase pinada a força aplicada é pequena. Se a força aplicada é aumentada, então a interface consegue superar a força de travamento da inomogeneidade do meio a partir de um valor crítico F_c . O ruído térmico afeta o movimento da interface na região próxima e abaixo da transição. A interface move-se mesmo com $F < F_c$.

No regime de grandes velocidades, que ocorre quando $F >> F_c$, a velocidade da interface aumenta linearmente com F e o movimento pode ser descrito novamente pela equação KPZ (2.13). O ruído independente do tempo torna-se assintoticamente irrelevante e o ruído térmico é recuperado [10]. Um fenômeno promissor para ser descrito utilizando o conceito de rugosidade cinética é o processo de queima em meios aleatórios.

2.7 SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO KPZ

A integração numérica direta tem sido um importante meio para investigar a equação KPZ [11], no entanto, deve ser feita com especial cuidado, pois diferentes tipos de discretização podem levar a resultados espúrios. Uma primeira abordagem pode ser feita pelo método de Euler:

$$h_i^{n+1} = h_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left[\nu_0 (h_{i+1}^n + h_{i-1}^n - 2h_i^n) + \frac{\lambda_0}{8} (h_{i+1}^n - h_{i-1}^n) \right] + \sqrt{\frac{2D_0 \Delta t}{\Delta x}} \xi_i^n, \quad (2.19)$$

onde $h_i^{n+1} \approx h(x_i, t_{n+1})$ é a posição da célula *i* no passo de tempo n + 1. A largura Δx de cada célula pode ser assumida por uma escolha de unidades como sendo igual a 1. Cada ξ_i^n é uma variável aleatória independente com média zero e variância unitária seguindo a distribuição Gaussiana. Os parâmetros ν_0 , $\lambda_0 \in D_0$ são valores nominais usados na equação discreta e que podem ser diferentes dos valores efetivos da equação contínua (2.13) em decorência do tipo de discretização utilizada [12]. Tal inconveniente pode ser evitado utilizando outro tipo de discretização, como veremos a seguir. A forma discretizada da equação KPZ (2.19) pode ser escrita genericamente como:

$$\frac{dh_i(t)}{dt} = \nu_0 \Gamma_i + \frac{\lambda_0}{2} \Psi_i + \eta_i(t), \qquad (2.20)$$

onde $\Gamma_i \in \Psi_i$ podem ter formas explícitas diferentes segundo a discretização escolhida. No caso da equação (2.19) $\Gamma_i = h_{i+1} + h_{i-1} - 2h_i$ é o termo difusivo e $\Psi_i = 1/4(h_{i+1} - h_{i-1})^2$ é o termo não-linear. No entanto, Lam e Shin [12] reportaram inconsistências intrínsecas do método de Euler convencional, uma vez que o coeficiente de difusão ν é incompatível com seu valor nominal usado na equação (2.19). Eles usaram o método inverso [4] para calcular independentemente ν e D a partir de realizações de superfícies simuladas e encontraram valores incongruentes com os valores discretizados calculados pelo método convencional. A partir daí foi proposto um método de discretização que garantiu que a distribuição de probabilidade de estado estacionário obtida da simulação coincidisse com a obtida analiticamente [11]. Dessa forma, tais autores mostraram que uma forma mais apropriada de discretização para o termo não-linear passa a ser:

$$\Psi_i = \frac{1}{3} \left[(h_{i+1} - h_i)^2 + (h_{i+1} - h_i)(h_i - h_{i-1}) + (h_i - h_{i-1})^2 \right]$$
(2.21)

Com essa escolha os parâmetros contínuos podem ser calculados de tal modo que se obtenha todos os três parâmetros em concordância exata com os valores nominais.

$$\nu = \nu_0, \ \lambda = \lambda_0, \ D = D_0. \tag{2.22}$$

2.8 MODELAGEM DA EQUAÇÃO KPZ

Tipicamente as abordagens relativas ao fenômeno de enrugamento cinético das interfaces dizem respeito à determinação da classe de universalidade à qual o processo considerado pertence. Um método direto e bastante usado é medir algumas propriedades de escala, normalmente os expoentes dinâmicos, e compará-las com aquelas obtidas analítica ou numericamente para modelos conhecidos [13].

O método aplicado nesta pesquisa vai no sentido de determinar diretamente a equação estocástica de evolução a partir dos dados simulados de queimas de materiais. Alguns métodos já foram propostos para realizar tal abordagem. A primeira reconstrução da equação KPZ a partir de dados experimentais é creditada a Lam e Sander [4]. Os autores propuseram um método inverso baseado num esquema de diferenças finitas para aproximar a dinâmica e basearam a reconstrução num algoritmo de mínimos quadrados.

O método pseudoespectral apresentado por Giacometti e Rossi [5] e posteriormente reformulado pelos próprios autores [14] é uma formulação alternativa. A estratégia básica consiste em aplicar o procedimento de mínimos quadrados para as funções correlação ao invés de diretamente às variáveis estocáticas da interface. O método, no entanto, apresentava deficiências intrínsecas quanto à discretização espacial e precisou ser reformulado, introduzindo-se uma representação espectral da equação de Langevin.

2.8.1 Método inverso

A proposta de Lam e Sander [4] baseia-se no fato de que uma sequência de imagens instantâneas da superfície captura suas propriedades dinâmicas até o limite de sua resolução. Daí encontra-se uma equação geral candidata para descrever a evolução contendo todos os termos consistentes com a simetria. A tarefa é discriminá-los. Dada uma interface instantânea, realizações da equação com diferentes coeficientes fornecem diferentes predições para o próximo passo. A equação correta é aquela que dá as melhores predições para um número grande de tentativas, que pode ser obtida minimizando os erros das predições.

Discretizando o tempo, obtemos uma formulação para a equação KPZ:

$$\frac{\Delta h(x,t)}{\Delta t} \simeq \vec{a} \cdot \vec{H}(x,t) + \eta(x,t), \qquad (2.23)$$

onde $\vec{a} = (c, \nu, \frac{\lambda}{2})$ e $\vec{H} = (1, \nabla^2 h, (\nabla h)^2)$. Note que o termo de crescimento linear, representado pela constante c, será necessário para este trabalho.

O vetor de parâmetros \vec{a} é aquele que melhor descreve a sequência de imagens instantâneas da superfície. Para determinar \vec{H} sobre uma malha numérica, tomamos os dados de entrada para as interfaces discretas $h_d(x_i, t_j)$. Procede-se então ao *coarse graining* truncando a série de Fourier com comprimentos menores do que um valor l especificado, que define a resolução espacial. As derivadas são então calculadas mais facilmente no espaço de Fourier.

Tomemos m realizações de $h_d(x, t + k\Delta t)$, com $k = 0, \dots, m-1$. Para m grande obtemos

$$\frac{\langle \Delta h(x,t) \rangle}{\Delta t} \simeq \vec{a} \cdot \vec{H}(x,t).$$
(2.24)

Adotando $\Delta h_i(t) = h_i(t + \Delta t) - h_i(t)$ na equação (2.24), fazemos um ajuste de mínimos quadrados do desvio quadrático médio de (2.24), que é a seguinte expressão:

$$j = \left\langle \left[\frac{\Delta h_i(t)}{\Delta t} - \vec{a} \cdot \vec{H}_i(t) \right]^2 \right\rangle.$$
(2.25)

Minimizando (2.25) com relação ao vetor \vec{a} obtemos

$$A\vec{a} = \vec{b},\tag{2.26}$$

onde a matriz A e o vetor \vec{b} são dados por:

$$A = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \vec{H}_i \otimes \vec{H}_i, \qquad \vec{b} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{\langle \Delta h_i \rangle}{\Delta t} \vec{H}_i.$$
(2.27)

O correlacionador do ruído (D) é calculado a partir de

$$\langle \eta(x,t)\eta(x',t')\rangle = 2D\delta(x-x')\delta(t-t').$$
(2.28)

Na malha numérica a função δ é discretizada e assume valores $1/\Delta x$ e $1/\Delta t$, quando x = x' e t = t', respectivamente. Assim,

$$\langle \eta(x,t)\eta(x,t)\rangle = 2D\frac{1}{\Delta x}\frac{1}{\Delta t}.$$
 (2.29)

Por outro lado, podemos tirar a média do quadrado da equação (2.23), o que resulta em

$$\langle \eta(x,t)\eta(x,t)\rangle = \left\langle \left(\frac{\Delta h}{\Delta t} - \vec{a}\cdot\vec{H}\right)^2 \right\rangle.$$
 (2.30)

Igualando (2.29) e (2.30), obtemos a outra equação principal, donde calculamos D,

$$D = \frac{\Delta t \Delta x}{2} \left\langle \left(\frac{\Delta h}{\Delta t} - \vec{a} \cdot \vec{H}\right)^2 \right\rangle.$$
(2.31)

Assim, são encontradas expressões para todos os parâmetros na formulação contínua.

2.8.2 Uma abordagem modificada

O método inverso ilustrado anteriormente utiliza transformadas de Fourier para o cálculo das derivadas. Além disso, o cálculo da derivada temporal requer curtos passos de tempo entre uma imagem instantânea e outra, o que pode inviabilizar sua aplicação em casos de observação de queimadas reais. Para superar tal dificuldade desenvolvemos um procedimento que permite passos de tempo maiores e com boa acurácia. Na nossa abordagem, as derivadas são calculadas por diferenças finitas seguindo as expressões (2.21) e o termo não-linear em (2.19). Dessa forma, o procedimento numérico adotado nesta pesquisa para o ajuste dos parâmetros da equação KPZ, que melhor descrevem a evolução da frente de fogo superficial, utiliza princípios de solução numérica expostos na seção 2.7, do método inverso de Lam e Sander [4] e de um método de otimização de funções simplex [15].

Inicialmente realizamos uma simulação de queima de um material. Daí, extraem-se os valores de posição das frentes para determinados passos de tempo e para uma dada resolução espacial. Dada a condição inicial $h(x_i, 0)$ e um conjunto de tentativa inicial para os valores dos parâmetros (c, ν, λ) , a equação KPZ é resolvida numericamente utilizando o procedimento da seção 2.7. A solução numérica $h_N(x_i, t_k)$ é então comparada com os dados de entrada $h_S(x_i, t_k)$, com $i = 0, \dots, L$ e $k = 0, \dots, M$. O erro quadrático médio é dado neste caso por:

$$\mathcal{E}^2 = \frac{1}{LM} \sum_{i,k} (h_N(x_i, t_k) - h_S(x_i, t_k))^2.$$
(2.32)

O procedimento consiste, então, em minimizar \mathcal{E} em função de $c, \nu \in \lambda$. No nosso caso escolhemos o método simplex, que apesar de ter uma convergência mais lenta, permite explorar uma região maior do espaço de parâmetros [16].

O cálculo do correlacionador do ruído D é feito por meio da expressão (2.31), do mesmo modo que no método inverso. No entanto, a derivada temporal é estimada a partir da solução numérica, que pode assumir passos de tempo tão pequenos quanto se queira. Ou seja, não é necessário um pequeno intervalo de tempo entre uma imagem instantânea e outra da simulação. Adotamos ruído nulo na solução numérica, portanto, a diferença entre as frentes simulada e calculada, em cada passo de tempo discreto, é atribuída ao ruído.

Capítulo 3 DINÂMICA DE INCÊNDIOS

3.1 INTRODUÇÃO

Uma das aplicações mais importantes da dinâmica de crescimento de interfaces é o modelamento da propagação de frentes de fogo. Fogo é uma reação de combustão envolvendo um material combustível e um oxidante, em geral o ar atmosférico, com liberação de energia suficiente para ser sentida, em especial pela pele [17]. Estipula-se a taxa mínima de liberação de energia para se considerar a reação como fogo no patamar de 1000 kW/m^3 . O incêndio é o fogo fora de controle, que queima aquilo que a ele não é destinado queimar, sendo capaz de produzir danos à vida e ao patrimônio por ação das chamas, do calor e da fumaça.

Segundo Quintiere [17] 2,5 milhões de incêndios ocorrem nos Estados Unidos a cada ano, provocando cerca de 5000 mortes. Considerando a população da época (1995) naquele país, tem-se a frequência de morte por incêndio de 1 pessoa em cada grupo de 700. Obviamente o risco de morte por incêndio não é tão alto quanto o risco de morte por acidentes de trânsito, por exemplo. Porém, os prejuízos advindos do incêndio e seus impactos na sociedade (vejam-se os casos do incêndio florestal do Parque Nacional de Brasília em 2007, incêndios do prédio do INSS em Brasília no ano de 2005 e do edifício Joelma em São Paulo em 1974) justificam o investimento e a pesquisa na prevenção, no combate e na investigação de tais sinistros.

O estudo do fogo envolve uma multiplicidade de áreas do saber, tais como a Física, a Química e as Engenharias. Partes importantes da termodinâmica, da mecânica dos fluidos, da transferência de calor e da cinética química são necessárias para descrever o tema.

3.2 FOGO E SEU CRESCIMENTO

Devem coexistir quatro elementos para que o fenômeno do fogo ocorra e se mantenha. São eles: combustível, comburente (oxigênio do ar atmosférico), fonte de energia (agente ígneo) e reação em cadeia. Esse é o chamado tetraedro (ou quadrado) do fogo. Combustível é toda substância capaz de queimar e alimentar a combustão, servindo de campo de propagação do fogo. São exemplos: madeira, gasolina e gás liquefeito de petróleo. É importante destacar que geralmente a reação de queima ocorre na fase vapor ou gasosa do material combustível. Ou seja, o material será aquecido gradualmente pela fonte ígnea até mudar de fase e chegar à temperatura de ignição. Esse processo de decomposição térmica é denominado de pirólise.

Comburente é o elemento que possibilita vida às chamas e intensifica a combustão. É a substância às custas da qual se dá a combustão. No caso do incêndio, o mais comum é que o oxigênio do ar ambiente desempenhe esse papel. Quando a concentração de oxigênio do ar atmosférico cai de seu nível normal, 21%, para a faixa compreendida entre 15% e 8%, a combustão passa a ser incompleta, as chamas desaparecem e ficam somente brasas. Quando o oxigênio contido no ar do ambiente atinge concentração menor que 8%, não há combustão.

Agente ígneo ou calor é o elemento que inicia a combustão e é definido como uma forma de energia que se transfere de um sistema para outro em virtude de uma diferença de temperatura. Exemplos são uma chama de cigarro ou de vela, uma fagulha (faísca ou centelha) ou ainda uma superfície aquecida [18].

A reação química ocorrida na combustão processa-se em etapas, resultando em subprodutos intermediários instáveis da quebra molecular do material combustível devido à ação do calor. Cada etapa libera mais energia para alimentar as próximas, tornando o processo de queima auto-sustentável. Daí a denominação reação em cadeia.

O processo de queima em um incêndio ocorre em estágios ou fases claramente definidos, seja de um incêndio estrutural ou florestal [18]. O crescimento do incêndio pode ser qualitativamente bem caracterizado pela temperatura como função do tempo, onde são distinguíveis quatro etapas: fases inicial, crescente, totalmente desenvolvida e final.

Na fase inicial ocorre a ignição do material combustível na presença de oxigênio, ainda abundante, do ar atmosférico. Nessa fase, o fogo está restrito ao objeto inicialmente em queima e às suas proximidades (foco do incêndio). É necessário que as perdas de calor do objeto sejam menores que a soma de calor proveniente da fonte externa e do calor gerado no processo de combustão. Nesse sentido, se a fonte de calor for pequena, ou a massa do material a ser queimado for grande, ou, ainda, se

a sua temperatura de ignição for muito alta, somente irão ocorrer danos locais, sem a evolução para um incêndio de maiores proporções. A duração da fase inicial pode variar de alguns minutos a vários dias.

Na segunda fase, a propagação das chamas em direção aos materiais presentes nas proximidades, por meio de condução, convecção ou radiação, dá origem a uma elevação rápida da temperatura do ambiente e o desenvolvimento de fumaça e outros gases inflamáveis. Esse aumento de temperatura faz com que os materiais ao redor sofram pirólise e atinjam sua temperatura de ignição. Durante a fase crescente, o ar rico em oxigênio é arrastado para dentro da zona de queima, num processo chamado de chama difusa.

Durante a fase crescente o fogo em edificações pode apresentar um comportamento extremo, denominado generalização do incêndio ou *flashover*. Os materiais presentes no ambiente aquecerão até atingirem seu ponto de ignição simultaneamente, ocasião em que haverá uma queima instantânea e generalizada desses produtos, ficando toda a área envolvida em chamas.

A fase totalmente desenvolvida é aquela em que ocorre uma queima estável. Continuará ocorrendo a reação entre os gases combustíveis liberados pelo aquecimento dos materiais e o oxigênio do ar ambiente. Porém, pode existir limitação da disponibilidade de quantidade de material combustível ou de concentração de oxigênio no ar. Quando não há mais material combustível suficiente para sustentar a queima ou a concentração de oxigênio é muito baixa, passa-se à fase seguinte, a fase final ou de resfriamento.

Na fase final, as chamas podem deixar de existir se não houver ar suficiente para mantê-las (abaixo de 15% de oxigênio) e o fogo é reduzido a brasas. No caso de incêndio estrutural, pode ocorrer outro fenômeno extremo do fogo, denominado explosão de fumaça ou *backdraft*, que ocorre devido a uma ventilação inadequada no ambiente em que se dava uma combustão incompleta. Quando o recinto aquecido é suprido perigosamente com oxigênio, reinicia-se violentamente a combustão.

A caracterização quantitaiva do crescimento do incêndio é feita pelo estudo da *ignição, propagação de chamas e taxa de queima*. A ignição informa quando o fogo começa a crescer. A propagação das chamas permite definir as fronteiras da área de queima e a taxa de queima fornece a quantidade de energia liberada na região de interesse.

3.2.1 Ignição

A ignição pode ser definida como um processo no qual uma rápida reação exotérmica é iniciada, que se propaga e provoca uma mudança no material envolvido, produzindo temperaturas muito mais elevadas do que a ambiente [19]. Existem diferentes mecanismos de ignição para combustíveis gasosos, líquidos e sólidos. No entanto, como a reação de queima ocorre geralmente na fase gasosa, é importante iniciar o estudo pela ignição de misturas inflamáveis de vapor/ar. A ignição pode ocorrer de forma espontânea, autoignição, ou induzida por uma chama piloto, ignição induzida. A chama piloto é uma fonte externa de calor, que na prática pode ser uma faísca, uma centelha, uma superfície aquecida ou, ainda, as chamas do fogo.

Embora seja comum falar em gases ou líquidos inflamáveis, na verdade, as misturas só queimarão em determinadas faixas de concentração de combustível no ar. Essas concentrações são denominadas *limites superior e inferior de inflamabilidade*. O aumento de temperatura faz com que os limites sejam alargados (vide figura 3.1). Para uma dada temperatura, dentro dos limites de inflamabilidade de um material, uma pequena fonte de energia inicia uma queima que se sustenta na mistura mesmo depois de retirada a fonte de calor. Essa temperatura é conhecida como *ponto de ignição* (ou *firepoint*). Se a temperatura for reduzida, o vapor se condensará e ainda assim terá limites superior e inferior de inflamabilidade. A temperatura do limite inferior da fronteira da pressão de vapor saturado é chamada de *ponto de fulgor* (ou *flashpoint*). Nessa temperatura, a chama inicia-se ao entrar em contato com uma fonte de calor externa, mas não se sustenta. No outro extremo de temperatura está o *ponto de autoignição*, que é a temperatura a partir da qual a queima ocorre mesmo sem entrar em contato com uma chama piloto.

Um importante fator a ser considerado no estudo da dinâmica de incêndios é se a mistura oxigênio-combustível se dá antes da ignição ou se ocorre na zona de queima. No primeiro caso temos a chama pré-misturada, que pode ser obtida num bico de Bunsen ou na boca de um fogão. O segundo caso é o da chama difusa, que é típico de incêndios naturais. A chama difusa é o processo de combustão no qual o combustível e o oxigênio são transportados para a zona de queima em decorrência da diferença de concentração [17]. Esse processo de transporte é chamado de difusão e é governado pela lei de Fick, que estabelece que uma dada espécie se move de uma região de alta para outra de baixa concentração.



Figura 3.1: Limites de inflamabilidade [17].

A maior parte dos combustíveis sólidos passa para a fase vapor antes de alcançar a ignição, mediante pirólise. Exemplos de exceção dessa regra são: o enxofre, os metais alcalinos, a cânfora e a naftalina, que queimam diretamente em sua forma sólida [18]. Da mesma forma, os combustíveis líquidos não entram em combustão diretamente, somente após a vaporização ou sua dissolução em pequenas gotas (atomização) que ocorre a queima. A taxa de evaporação é controlada pela temperatura do líquido e pela pressão. Na superfície de um líquido evaporando, a concentração de vapor está em equilíbrio e é máxima para aquela temperatura. Aumentando a temperatura chega-se à temperatura de ebulição. No entanto, não é preciso que se chegue a tal temperatura para que ocorra a queima, bastando chegar ao ponto de fulgor ou ao ponto de ignição.

A temperatura do ponto de fulgor para líquidos pode ser medida com boa precisão e também ser computada da teoria. Para tanto usa-se o aparato de taça fechada de Pensky-Martens: o líquido é aquecido lentamente (5-6°C por minuto) num vaso fechado e uma pequena chama piloto é introduzida na parte do recipiente com vapor. O ponto de fulgor é anotado quando ocorre a ignição da mistura. A proporção de vapor no ar pode ser calculada a partir da pressão de vapor de equilíbrio do líquido por meio da equação de Clapeyron-Clausius [19]:

$$\frac{d(lnp)}{dT} = \frac{L_v}{RT^2},\tag{3.1}$$

onde p é a pressão de vapor, L_v é o calor latente de vaporização e R é a constante universal dos gases.

A classificação dos combustíveis líquidos por meio do ponto de fulgor é uma forma conveniente de quantificar os riscos de incêndio da substância. Líquidos com baixo ponto de fulgor representam maior risco, pois à temperatura ambiente podem queimar facilmente na presença de uma chama piloto. Já os líquidos com temperaturas de ponto de fulgor mais elevadas somente queimarão se passarem do ponto de ignição.

A temperatura de ignição de sólidos não é tão precisamente determinada como a dos líquidos. O ponto de ignição dos sólidos depende da concentração de combustível volatilizado e da forma como o material é aquecido. A formação de voláteis inflamáveis envolve decomposição química do sólido, que é um processo irreversível. Para os sólidos não existe equivalente à pressão de vapor de equilíbrio que possa ser usado para calcular o ponto de fulgor como no caso dos líquidos. No entanto, é razoável assumir que valham os mesmos princípios anteriormente empregados, isto é, que o ponto de fulgor esteja associado a condições mínimas para que a pirólise atinja o limite inferior de inflamabilidade e que o ponto de ignição corresponda a uma mistura próxima da estequiométrica ideal junto à superfície.

A ignição dos combustíveis sólidos possui um parâmetro chave, que é a temperatura da superfície. Se e quando a superfície atinge a temperatura de ignição é a chave para encontrar o tempo de ignição. Isso dependerá da forma como se dá o aquecimento e das propriedades do material, bem como da sua espessura. Por exemplo, madeira aquecida por um fluxo de ar quente ignifica a aproximadamente 200 °C, enquanto que se for aquecida por fluxo de calor radiativo sua temperatura de ignição varia entre 300 e 400 °C [17]. O fluxo de calor radiativo crítico é muitas vezes usado como critério para o alcance da ignição induzida embora seja sensível a mudanças nas perdas de calor da superfície e, portanto, dependente da geometria e orientação da superfície. A partir dos estudos de Lawson e Simms [20] e outros dados, encontrou-se, por exemplo, um fluxo mínimo de $12kW/m^2$ para a ignição induzida da madeira [19].

Um sólido atingirá sua temperatura de ignição se o fluxo de calor líquido \dot{q}'' for suficientemente convertido em energia interna, capaz de aumentar a temperatura.

Quão rápido se dá esse processo depende da capacidade de armazenamento de energia do material, que é medida em termos da densidade ρ , do calor específico c e da espessura l. Um caso de aquecimento radiativo de uma placa fina infinita com propriedades térmicas uniformes e independentes da temperatura pode ilustrar a situação. O tempo para se alcançar a temperatura de ignição T_{ig} a partir de uma temperatura incial T_0 é dada por [17]:

$$t_{ig} = \frac{\rho cl}{\dot{q}''} (T_{ig} - T_0). \tag{3.2}$$

No entanto, essa fórmula aplica-se bem somente para taxas elevadas de aquecimento e curtos períodos de tempo. A figura 3.2 mostra um exemplo do comportamento mais completo. É de se reparar que uma baixa taxa de aquecimento pode não levar à ignição do material.



Figura 3.2: Comportamento da ignição de acordo com a taxa de aquecimento do material [17].

A partir da equação $\partial \dot{q}'' / \partial x^2 = (1/\alpha) \partial \dot{q}'' / \partial t$, onde $\alpha = \kappa / \rho c$ é a difusividade térmica, obtemos o tempo de ignição também para materiais espessos pela relação:

$$t_{ig} \propto \kappa \rho c \frac{(T_{ig} - T_0)^2}{\dot{q}''^2}.$$
 (3.3)

No entanto, cabe a mesma ressalva anteriormente feita: esse é um comportamento válido para determinadas condições e não pode ser extrapolado linearmente para outras situações. As perdas de calor para a vizinhança foram ignoradas na obtenção das equações (3.2) e (3.3). Para tempos longos, quando não se pode ignorar os efeitos das perdas de calor (de 5 a 10 min), o comprimento de condução térmica característico pode ser usado como indicador da profundidade de penetração da ação térmica. Desse modo, materiais com $l > 4\sqrt{\alpha t}$ são ditos "espessos" e materiais com $l < \sqrt{\alpha t}$ são ditos "finos".

3.2.2 Propagação de chamas

Após a ignição vem a *propagação das chamas*, definida como o processo no qual o perímetro do fogo cresce [17]. Especificamente interessa a extensão da região de queima. De forma mais geral pode-se falar em *propagação do fogo*, que se aplica ao processo de crescimento da combustão, incluindo a propagação superficial de chamas e o crescimento da incandescência. Nesse avanço da frente de fogo, as fronteiras da chama agem como fonte de aquecimento do material ainda não queimado à sua frente e envolve problemas não-estacionários de transferência de calor.

A velocidade de propagação das chamas v é definida como a taxa de movimento da posição da fronteira do fogo x_p , que denota a região de pirólise na figura 3.3. Na posição x_p atinge-se a temperatura de ignição T_{ig} , com uma região de influência rotulada por δ_f , onde a temperatura diminui até se chegar à temperatura inicial da superfície T_s .



Figura 3.3: Modos de propagação de chamas [17].

A equação fundamental da velocidade de propagação das chamas afirma que a taxa de energia suprida para aquecer o combustível à frente da linha de fogo, até sua temperatura de ignição, é igual à taxa de transferência de calor líquida \dot{q} a partir da região de queima [17]:

$$\dot{q} = \rho v \Delta h, \tag{3.4}$$

onde Δh é a variação na entalpia quando a unidade de massa do combustível é aquecida da temperatura inicial até a temperatura de ignição.

A propagação superficial das chamas pode ser influenciada por fatores físicos, químicos e ambientais [19]. São eles: composição do combustível, presença de retardantes, temperatura inicial da superfície, orientação da superfície, direção de propagação, espessura, capacidade térmica, condutividade térmica, densidade, geometria e continuidade do material, composição da atmosfera, pressão atmosférica, temperatura ambiente, fluxo de calor imposto e velocidade do ar.

A propagação das chamas nos combustíveis líquidos tem mecanismos similares aos dos combustíveis sólidos. Entretanto, no líquido, a propagação de chamas pode induzir movimentos convectivos. A variação da tensão superficial é o principal mecanismo que faz diferir a propagação de chamas em líquidos e sólidos. Uma vez que a tensão superficial decresce com a temperatura, o líquido mais frio à frente da chama tem tensão superficial maior, que arrasta a chama para essa região mais fria do líquido. Desse modo, velocidades de propagação em líquidos são maiores do que aquelas esperadas em sólidos por causa dos fluxos devidos ao empuxo e à variação da tensão superficial.

Dentre os fatores que influem na taxa de propagação de chamas, tem-se a questão da orientação da superfície e da direção de propagação. A propagação para baixo é mais lenta e menos sensível à orientação da superfície, ficando em torno de 1,3 mm/s para ângulos entre -90° e -30° (vide figura 3.4). Variações de -90° a $+90^{\circ}$ na superfície produzem taxas de propagação até 50 vezes maiores. Isso se deve à forma como a entrada de ar ocorre na zona de queima. Os fluxos resultantes do empuxo e do vento natural da atmosfera podem ajudar a propagação das chamas caso estejam no mesmo sentido, denominando-se *a favor do fluxo de ar*, ou podem dificultar a propagação se estiverem em sentido contrário, denominando-se *contra o fluxo de ar*.



Figura 3.4: Influência da inclinação da superfície na taxa de propagação de chamas: (a)-90°; (b)-45°; (c) 0° ; (d)+45°; (e)+90° [19].

Exemplificando a diferença entre os dois tipos de propagação, tomemos o caso da propagação vertical para baixo. Nessa situação os gases da chama fluem para longe da área não-queimada, impossibilitando a transferência de calor por convecção e radiação. Desse modo, a condução na fase gasosa é o mecanismo prediominante para combustíveis finos e a condução na fase sólida é dominante para combustíveis espessos. Há que se considerar a espessura do material. Nos combustíveis finos a queima ocorre de ambos os lados do objeto, contribuindo para maiores taxas de propagação entre -30° e 0°.

Ainda que a propagação de chamas possa ser tratada como um problema de estado quasi-estacionário, ele envolve processos de transferência de calor transiente. A frente de fogo representa uma fronteira entre material queimado e não-queimado. Assim como na ignição, a transferência de calor da superfície para o interior do combustível influencia o processo significativamente. Desse modo, se o combustível é muito fino ele pode ser tratado pelo modelo da capacidade térmica total (*lumped*), no qual não há gradiente de temperatura entre as faces do objeto. Nesse caso, a taxa de propagação é inversamente proporcional à espessura do material. Para combustíveis espessos, a propagação da chama é independente da espessura, chegando a anular-se para espessuras muito elevadas, como por exemplo, papel com espessura superior a 8,4mm [19]. Vimos que a espessura crítica que define materiais termicamente espessos e finos está relacionada com a raiz quadrada de αt :

$$l_{cr} \propto \sqrt{\alpha t_i g} = \sqrt{\frac{\kappa}{\rho c} t_{ig}}.$$
(3.5)

Por outro lado,

$$V = \frac{\delta_f}{t_{ig}}.\tag{3.6}$$

Então, da equação (3.2) temos que:

$$V \propto (\rho c l)^{-1}, \tag{3.7}$$

para materiais finos. Já para materiais espessos, temos, a partir de (3.3):

$$V \propto (\kappa \rho c)^{-1}.$$
 (3.8)

Em alguns casos, a condutividade térmica κ é proporcional à densidade ρ . Isso faz com que a taxa de propagação das chamas seja altamente sensível à relação massa/volume do material combustível e explica em parte o motivo pelo qual plásticos esponjosos e outros materiais de baixa densidade propagam chama e queimam tão rapidamente.

A largura w do objeto tem pouco ou nenhum efeito sobre a taxa de propagação para baixo. No entanto, para cima observou-se que $v \propto \sqrt{w}$ [19]. Esse resultado, válido para 6 < w < 100mm, está relacionado com o aumento da altura da chama a partir do aumento da área de queima. Isso ilustra a dificuldade de realizar testes em pequenas escalas para acessar o comportamento do fogo. Além disso, há o fato de que alguns materiais passam da fase sólida para a líquida enquanto queimam, dificultando as análises. Para combustíveis sólidos espessos com largura apreciável, espera-se que o mecanismo de transferência de calor radiativo à frente da chama seja o principal mecanismo de propagação do fogo dado o tamanho das chamas. A composição da atmosfera influencia pela proporção de oxigênio presente, entenda-se atmosfera rica em oxigênio como sendo aquela em que a pressão parcial de O_2 é maior do que a normal, isto é, 160 mmHg. A taxa de propagação das chamas nesse caso é maior porque sua temperatura é maior e aumenta a transferência de calor para o combustível ainda não queimado. Taxas elevadas de propagação são observadas em regiões de alta pressão atmosférica por causa do enriquecimento de oxigênio, que aumenta a estabilidade da chama na superfície. Nota-se também que essa dependência é muito menor para combustíveis finos do que para espessos [19].

A temperatura do combustível altera a taxa de propagação pois, quanto maior a sua temperatura, menor será a quantidade de calor necessária para elevar o combustível ao ponto de ignição. A existência de um fluxo de calor radiativo imposto externamente à região de queima aumenta a taxa de propagação, primeiramente por pré-aquecer o combustível não queimado e também por prover chamas mais fortes, devido à taxa de queima maior atrás das chamas. Os dois fatores juntos fornecem mais calor à frente da linha de fogo.

O vento a favor aumenta a taxa de propagação das chamas exponencialmente até um certo limite, onde ocorre a extinção. O vento no sentido oposto, a baixas velocidades, favorece a propagação por promover a mistura ar-combustível. Porém, a altas velocidades há uma tendência de diminuição da taxa de propagação em decorrência do resfriamento do combustível não queimado.

3.2.3 Taxa de queima

Taxa de queima é definida como a massa de combustível sólido ou líquido consumida por unidade de tempo. Salienta-se que não necessariamente todo combustível vaporizado será queimado, isto é, reagirá com o oxigênio. Por exemplo, grandes incêndios estruturais podem alcançar uma situação de ventilação deficiente e, assim, nem todo combustível pirolizado irá queimar. A taxa de suprimento de voláteis a partir da superfície do combustível está diretamente relacionada à taxa de transferência de calor da chama para a superfície do material. A fórmula preditiva geral para a taxa de queima \dot{m}'' é:

$$\dot{m}'' = \frac{\dot{q}''}{L_v},\tag{3.9}$$

onde L_v é o calor requerido para produzir voláteis (calor de vaporização), que é uma propriedade termodinâmica expressa com boa acurácia para combustíveis líquidos. No entanto, para os combustíveis sólidos, especialmente aqueles que queimam deixando resíduos, o calor de vaporização é uma propriedade média aproximada, que pode variar com o tempo.

O fluxo de calor líquido \dot{q}'' é principalmente devido às chamas acima da superfície do material incendiado, mas pode ser aumentada por fontes externas de calor radiativo. Esse fluxo de calor da chama para a superfície está relacionado com a taxa de liberação de energia dentro da chama e envolve as três formas de transferência de calor: condução, convecção e radiação. Desse modo, podemos explicitar o termo \dot{q}'' assim:

$$\dot{q}'' = \dot{q_F}'' + \dot{q_E}'' - \dot{q_L}'', \qquad (3.10)$$

onde $\dot{q_F}''$ é o fluxo de calor a partir da chama, que pode ser decomposto em três parcelas referentes a cada forma de transferência de calor, $\dot{q_E}''$ é o fluxo de calor radiativo externo e $\dot{q_L}''$, as perdas de calor pela superfície.

A equação (3.9) é uma ferramenta simples, porém, apropriada para estimar a taxa de queima, ainda que L_v seja apenas uma média aproximada para combustíveis que carbonizam e que o fluxo de calor líquido não seja prontamente acessível. Na verdade \dot{q}'' não pode ser firmemente definido sem medidas experimentais específicas. Valores típicos do fluxo da taxa de queima vão de 5 a 50 g/m^2s . A extinção do fogo pode ocorrer para valores inferiores a 5 g/m^2s quando o oxigênio é reduzido e também se a formação de vapor d'água é suficiente para consumir grande parte do fluxo de calor para a superfície.

A taxa de liberação de energia \dot{Q} é o fator isolado mais importante para caracterizar o comportamento do fogo [19]. Ela, mais do que qualquer outro fator, representa o tamanho do fogo e seu potencial para causar danos. A taxa de liberação de energia está relacionada à taxa de queima da seguinte maneira:

$$\dot{Q} = \dot{m}'' A_f \Delta H_c, \tag{3.11}$$

onde A_f é a área superficial do combustível e ΔH_c é o calor de combustão efetivo.

O calor de combustão efetivo difere do teórico, sendo aplicável durante a porção flamejante do fogo. O calor de combustão representa a energia química liberada por unidade de massa de combustível vaporizado durante a reação de combustão. É possível medir esse valor para combustíveis sólidos usando um aparelho chamado bomba de oxigênio. Medidas típicas de ΔH_c teórico para a madeira é de 19,5 kJ/g, no entanto, para a fase flamejante do fogo obtém-se 13 kJ/g enquanto que para a fase de incandescência (brasa) chega-se a 30 kJ/g [17]. A taxa de liberação de energia pode ser acessada experimentalmente por meio do cone calorímetro. Quase todo combustível sólido requer decomposição química (pirólise) para produzir os vapores combustíveis que irão desprender-se da superfície e queimar na chama. A descrição da pirólise é bastante complexa, porém, essa dificuldade pode ser contornada com o uso de dados empíricos de testes realizados em cone calorímetro, os quais permitem identificar os riscos de incêndio de um dado material.

Temperaturas superficiais durante a queima de sólidos são relativamente altas (> $350^{\circ}C$), tornando altas as perdas por radiação. O calor requerido para produzir voláteis L_v é consideravelmente maior para sólidos do que para líquidos. Alguns exemplos são apresentados na tabela 3.1.

Material combustível	$L_v(kJ/g)$
Polietileno	2,32
Policarbonato	2,07
Polipropileno	2,03
Madeira	1,82
Espuma (poliuretano)	$1,\!52$
Álcool etílico	$0,\!97$
Benzeno	0,49
Heptano	0,48

Tabela 3.1: Calor requerido para produzir voláteis.

Tewarson e Pion [21] verificaram que \dot{m}'' é função linear da fração molar de O_2 na atmosfera quando $\dot{q_E}''$ é constante. Além disso, quando a concentração de oxigênio é elevada ou a base do fogo é grande, a radiação torna-se o modo predominante de transferência de calor. Portanto, a emissividade da chama e o calor de vaporização são propriedades importantes no estudo. Das equações (3.9) e (3.11) percebe-se que a taxa de liberação de energia de um material em chamas é fortemente dependente da razão de combustibilidade, $\Delta H_c/L_v$. Para combustíveis sólidos essa razão varia de 3 a 30, enquanto que para líquidos inflamáveis, como o heptano, pode-se chegar a 93 [19]. Exame detido das equações acima revela que existem muitos fatores contribuintes que determinam a taxa de liberação de energia. Além disso, incluem propriedades não somente relacionadas com o material em si, mas também com o processo de combustão dentro da chama e as formas de transferência de calor.

3.2.4 Transferência de calor

A probabilidade de um foco de incêndio extinguir-se ou evoluir para um grande incêndio depende de diversos fatores, tais como: tipo, quantidade, volume, localização e espaçamento dos materiais combustíveis na edificação, fontes de ignição, área e locação das aberturas para ventilação, velocidade e direção do vento, características construtivas do recinto (material de construção, forma e dimensões), entre outros. Esses fatores estão relacionados com a transferência de calor, que ocorre de três formas fundamentais: por condução, por convecção e por radiação. Num incêndio, as três formas geralmente são concomitantes, embora em determinado momento uma delas possa predominar.

Condução é a forma de transferência de calor sem transferência de matéria, que se dá num meio sólido ou fluido quando existe uma diferença de temperatura. Na condução, o calor passa de partícula a partícula, mas nenhuma delas é transportada com o calor. A lei física que descreve o fenômeno é a chamada *lei de condução de calor de Fourier*, que estabelece que a taxa de variação temporal do calor fluindo através da matéria é diretamente proporcional à diferença de temperatura:

$$\dot{q} = \frac{dq}{dt} = \frac{kA\Delta T}{l},\tag{3.12}$$

onde k é a condutividade térmica, A é a seção transversal e l o comprimento do material e ΔT é a diferença de temperatura entre as duas faces do material.

Convecção é a transferência de calor que ocorre pelo movimento de matéria, como por exemplo, entre uma superfície e um fluido em movimento a temperaturas diferentes. A lei que governa a convecção é semelhante à da condução, porém, expressa em termos de h = k/l, o coeficiente de transferência de calor convectivo, e dada pela chamada *lei de resfriamento de Newton*:

$$\dot{q} = hA\Delta T. \tag{3.13}$$

A outra forma de transferência de calor é a *radiação* térmica. Todas as superfícies a uma temperatura finita emitem energia na forma de ondas eletromagnéticas, que não precisam de um meio material para se propagar. O fluxo de calor radiativo é proporcional à quarta potência da temperatura absoluta do objeto:

$$\dot{q}'' = \frac{\dot{q}}{A} = \sigma T^4, \tag{3.14}$$

onde σ é a constante de Stefan-Boltzmann. A equação (3.14) aplica-se a um radiador perfeito, o corpo negro. Para os objetos comuns devemos levar em conta a emissividade ϵ , que varia entre 0 e 1. Além disso, nem toda radiação emitida pela fonte será absorvida pelo alvo, fazendo com que entre em cena o fator de configuração F_c , que depende da distância entre fonte e alvo, do tamanho dos objetos, de sua geometria e da orientação relativa entre alvo e fonte. Com as devidas correções, a lei de Stefan-Boltzmann é escrita como:

$$\dot{q}'' = \epsilon \sigma T^4 F_c. \tag{3.15}$$

3.3 MODELAMENTO COMPUTACIONAL DO FOGO

Em razão da grande compexidade dos fenômenos envolvidos num incêndio e da dificuldade de controlar todas as variáveis em experimentos de escala real, foram desenvolvidos modelos computacionais para descrever o incêndio. Esses modelos evoluiram fortemente com o aumento do poder computacional e da complexidade dos projetos arquitetônicos das edificações, possibilitando a emergência de regulações baseadas em desempenho que complementam e, talvez, substituam as regulações somente prescritivas. Contudo, o uso de tais modelos requer conhecimento dos fundamentos físicos e químicos da dinâmica de incêndios para acessar e interpretar os resultados, determinando sua validade e acurácia. O modelamento computacional de incêndios pode utilizar dois métodos: o *método probabilístico* e o *método determinístico* [1]. No método probabilístico não se faz uso direto dos princípios físicos e químicos envolvidos no fogo, mas sim, de predições estatísticas sobre a transição de um estágio para outro do crescimento do incêndio. Envolve a distribuição de probabilidades de determinados eventos ocorrerem a partir de um cenário especificado. As probabilidades de evolução do fogo de uma fase para outra são determinadas a partir do conhecimento de dados experimentais e de dados estatísticos de ocorrências reais.

O método determinístico utiliza princípios físicos e químicos sobre a natureza do incêndio. Este método divide-se em diversas categorias, de acordo com o tipo de problema a ser investigado: transporte de calor e de fumaça, ativação de sistemas automáticos de combate (*sprinklers*) e de detectores de incêndio, evacuação de pessoas e perfis de temperatura em elementos estruturais, entre outros. Especificamente, quanto ao transporte de calor e de fumaça no incêndio, são usadas duas classes de modelamentos computacionais: modelos de camadas (ou duas zonas) e modelos de campos ou CFD (*computational fluid dynamics*).

Os métodos probabilísticos podem ser combinados com os métodos determinísticos para dar origem a métodos híbridos. Neste caso, o fogo é considerado determinístico uma vez que ele é totalmente definido, mas as entradas de dados são tratadas como variáveis aleatórias (probabilísticas). Esse método é aplicado na avaliação de riscos e análise de incertezas nos métodos determinísticos [1].

3.3.1 Métodos probabilísticos

Nos métodos probabilísticos o curso do incêndio é descrito como uma série de estágios discretos que sumarizam a natureza do fogo. Existem três formas básicas de modelos puramente probabilísticos: modelo de *rede (network)*, *estatístico* e de *si-mulação* [1].

Os modelos de rede usam representações gráficas de trajetórias pelas quais os objetos (energia, informação) podem se mover de um ponto a outro. Existem as árvores de decisão e as árvores de evento, que associam às relações de causalidade parâmetros lógicos de escolha entre dois ou mais possíveis caminhos a serem seguidos.

Os modelos estatísticos envolvem a descrição do fenômeno aleatório por meio de uma distribuição de probabilidade apropriada, enquanto que os modelos de rede atribuem probabilidade univalorada para cada evento. A distribuição de probabilidade pode usar dados históricos ou cálculos de engenharia.

O termo modelos de simulação é usado para descrever simulações computacionais onde diferentes conjuntos de condições são testadas um grande número de vezes para determinar como os dados de saída são afetados. O mais comum desses procedimentos é a simulação Monte Carlo.

3.3.2 Métodos determinísticos

Os métodos determinísticos, por utilizarem princípios físicos e químicos na determinação da evolução do incêndio, serão vistos em maior detalhe nesta seção. Iniciaremos o estudo pelo modelo de camadas e depois apresentaremos o modelo de campos.

O modelamento em camadas (ou zonas) divide o ambiente incendiado em duas partes uniformes: uma camada superior com gases quentes e outra camada inferior fria, resultante da estratificação térmica, devida ao empuxo. O fogo é considerado uma fonte de energia e de massa. Estas camadas interagem por meio da troca de calor e de massa. As leis de conservação de massa e de energia são aplicadas a cada camada. Deste modo, os modelos de camadas são entendidos como problemas de valor inicial para um sistema de equações diferenciais [22].

As equações do modelo de camadas são derivadas da aplicação da equação de continuidade, da primeira lei da termodinâmica e da equação de estado para gases ideais, além das definições de densidade e energia interna para cada camada. A conservação de momento é ignorada. São onze equações-chave [23]. Usando a primeira lei da termodinâmica, podemos escrever equações para a pressão, a energia interna, o volume, a densidade e a temperatura em cada camada. Assumimos que as taxas de calor e de massa podem ser calculadas a partir das propriedades de cada camada, tais como temperatura, densidade e outras [22]. Portanto, expressões adicionais para essas taxas de fluxo devem ser obtidas.

Além das 11 equações, temos 7 vínculos: a definição de densidade, a definição de energia interna e a aplicação da lei dos gases ideais em cada camada, bem como o fato de que o volume total das camadas é fixo. Como existem mais equações do que variáveis, esse é um sistema superdeterminado, bastando resolver quatro equações (11 equações com 7 vínculos). Cada sistema computacional baseado no modelo de camadas utiliza um algoritmo conveniente.

Os modelos computacionais determinísticos mais sofisticados são os modelos de campos, que utilizam a técnica de modelamento via dinâmica de fluidos computacional (DFC). Ela é baseada na solução completa, tri-dimensional e dependente do tempo das equações fundamentais de conservação de massa, de energia e de momento [1]. O uso de modelos DFC permite descrever incêndios em geometrias complexas e incorporar uma grande variedade de fenômenos físicos [24].

No modelo de campos, o ambiente incendiado é dividido em subvolumes (células) e as equações de conservação são aplicadas a cada célula. No presente modelo, a conservação de momento é explicitamente imposta. Assim, variáveis adicionais (as componentes da tensão viscosa devido ao escoamento do fluido) surgem no conjunto de equações. A substituição dessas na equação de conservação de momento (segunda lei de Newton aplicada ao escoamento do fluido) resulta nas conhecidas equações de Navier-Stokes e a solução destas é central para qualquer algoritmo de DFC [25].

Os códigos para modelamento via DFC são aplicáveis a diversas áreas como transporte de calor e de fumaça, mudança de fase, escoamento multifásico, reações químicas entre outras. No entanto, cada aplicação envolve particularidades que implicam em algoritmos diferentes. Desse modo, o modelamento DFC para incêndio envolve submodelos. Os submodelos mais importantes são: o modelamento da turbulência, o modelamento da fuligem e da radiação e o modelamento da combustão [1].

O modelo de turbulencia $\kappa - \epsilon$ pode ser baseado na forma média de Reynolds das equações de Navier-Stokes (RANS - Reynolds-averaged form of the Navier-Stokes equations). Duas equações diferenciais parciais de transporte são resolvidas, uma para a energia cinética turbulenta (κ) e outra para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ϵ). A principal desvantagem desse modelo é considerar que a turbulência não tem direção privilegiada, enquanto que no caso real de incêndio a gravidade atua na direção vertical. Outro meio de modelar a turbulência é por meio da simulação de grande escala (LES - large eddy simulation). A aplicação da técnica de LES aos incêndios garante maior fidelidade espacial e temporal às simulações, porém, às expensas de maior poder computacional. LES refere-se à descrição da turbulência como uma mistura dos gases combustíveis e dos produtos da combustão com a atmosfera da vizinhança do fogo. A idéia básica por trás da técnica de LES é que os vórtices importantes para a maior parte das misturas são grandes o suficiente para serem calculados com razoável acurácia a partir das equações da dinâmica dos fluidos [3].

As equações que descrevem o transporte de massa, momento e energia em escoamentos induzidos pelo fogo (termicamente) foram deduzidas por Rehm e Baum [26]. Essas equações da combustão para números de Mach baixos descrevem o movimento a baixa velocidade de um gás dirigido pela liberação de calor e pelas forças de empuxo [24].

O conjunto de equações de conservação de massa, momento e energia para um fluido Newtoniano, conforme aproximações de Anderson *et al* [25], para o simulador de dinâmica de incêndios (FDS - *Fire Dynamics Simulator*), que é um modelo DFC desenvolvido pelo Instituto Nacional de Padrões e Tecnologia dos Estados Unidos da América (NIST) é apresentado a seguir. O FDS foi utilizado para simular cenários de incêndio nesta pesquisa.

A conservação de massa é dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} = \dot{m}_b^{\prime\prime\prime}, \qquad (3.16)$$

onde \vec{u} é o vetor velocidade e $\dot{m}_{b}^{\prime\prime\prime}$, a taxa de produção de massa por unidade de volume. A conservação de momento é expressa por:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} \vec{u} + \nabla p = \rho \vec{g} + \vec{f}_b + \nabla \cdot \tau_{ij}, \qquad (3.17)$$

onde p é a pressão e $\vec{g} = (0, 0, -g)$ é a aceleração da gravidade, $\vec{u}\vec{u}$ é uma matriz 3x3 formada pela multipicação de $\vec{u}^T\vec{u}$ e \vec{f} representa as forças externas. O tensor tensão τ_{ij} envolve tensões tangenciais e normais e é definido por:

$$\tau_{ij} = \mu \left[2\vec{S}_{ij} - \frac{2}{3}\delta_{ij}(\nabla \cdot \vec{u}) \right], \qquad (3.18)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica do fluido, δ_{ij} é o delta de Kronecker e $\vec{S}_{ij} = (1/2)(\partial u_i/\partial x_j + \partial u_j \partial x_i)$ é o tensor deformação, com i, j = 1, 2, 3.

A conservação de energia é adotada da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot \rho h \vec{u} = \frac{Dp}{Dt} + \dot{q}^{\prime\prime\prime} - \dot{q}_b^{\prime\prime\prime} - \nabla \cdot \dot{\vec{q}}^{\prime\prime} + \Phi, \qquad (3.19)$$

onde h = h(T) é a entalpia e $\Phi \equiv \tau_{ij} \cdot \nabla \vec{u}$, a função dissipação, que é a taxa na qual a energia cinética é convertida em energia térmica devido à viscosidade do fluido. A derivada material é usada no primeiro termo do lado direito e é definida como:

$$\frac{D}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla, \qquad (3.20)$$

e o segundo termo do lado direito da equação (3.19) representa a taxa de liberação de calor da reação química por unidade de volume. O terceiro termo $\dot{q}_{b}^{\prime\prime\prime}$ representa a energia transferida para as gotículas que se evaporam, enquanto que $\dot{\vec{q}}^{\prime\prime}$ é o fluxo de calor radiativo e condutivo.

As equações (3.16), (3.17) e (3.19) juntamente com a equação de estado para gases perfeitos são usadas para modelos de campos. Algumas simplificações devem ser adotadas para o algoritmo do sistema computacional. São elas: tratar com gases perfeitos (ou ideais), fluidos Newtonianos (deformação proporcional à tensão), condução de calor dada pela lei de Fourier e dissipação desprezível. Além disso, efeitos de compressibilidade e ondas de choque são negligenciados, bem como a pressão é considerada constante.

Capítulo 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para testar a aplicação da abordagem de reconstrução da equação KPZ desenvolvida para esta pesquisa, usamos os resultados do simulador de incêndio *Fire Dynamics Simulator*(FDS) para gerar dados da frente de propagação do fogo, que são então utilizados para obter uma equação KPZ que os descreva. O FDS é um aplicativo livre de código aberto, que recebe os arquivos de entrada em formato de texto simples. O arquivo de entrada contém dados sobre a geometria do ambiente, a reação de combustão e as propriedades físico-químicas dos materiais ali presentes. O simulador é baseado em dinâmica de fluidos computacional e usa uma malha retilínea tridimensional para efetuar os cálculos. A malha pode ser constituída de milhares e até milhões de células, que são blocos retangulares. O *software* tem amplo uso na área de engenharia de incêndio e acurácia reconhecida internacionalmente [3].

O FDS trata cada objeto simulado como um sólido multicamada. De tal modo que os materiais modelados são apenas aproximações numéricas das propriedades reais de cada material. As propriedades térmicas, tais como condutividade, calor específico e densidade, podem ser encontradas em livros-texto. No entanto, o comportamento de queima dos materiais com diferentes fluxos de calor é mais intricado de descrever e as propriedades mais difíceis de encontrar na literatura. O aplicativo calcula a temperatura, a densidade, a pressão, o fluxo de calor e a taxa de perda de massa em cada célula. O usuário deve selecionar no arquivo de entrada os dados de saída requeridos. Existem dados disponíveis para a fase gasosa e para a fase sólida. A partir da simulação de queima dos gases oriundos da pirólise dos materiais combustíveis, são obtidas algumas quantidades, tais como:

- Temperatura superficial dos objetos;
- Temperatura dos gases;
- Velocidades dos gases;
- Concentração dos gases componentes da fumaça;
- Taxa de liberação de energia.

Existe também disponível uma ferramenta gráfica para visualização dos resultados gerados pelo FDS, o *Smokeview* (SMV). Esse aplicativo permite produzir animações e capturar imagens realísticas das simulações. Como exemplo de aplicação de nosso procedimento de modelagem da equação KPZ, utilizamos o FDS para modelar a propagação do fogo sobre um substrato de espuma. A figura 4.1 mostra uma sequência de imagens da queima da espuma produzidas pelo SMV. O perfil de temperatura da espuma durante a queima é exposta na figura 4.2.



Figura 4.1: Evolução da frente de fogo no simulador FDS.



Figura 4.2: Evolução do perfil de temperatura do material incendiado no simulador FDS.

O primeiro teste realizado foi para um pedaço de espuma de 1,60m x 2m. A amostra de espuma modelada segue proximamente as especificações do material constituinte de um sofá reproduzido como estudo de caso pelo NIST [27] para validação do pacote FDS. A resolução da malha variou de 32 (50 mm) a 128 (12,5 mm) células na direção do eixo x, sendo que a propagação do fogo se deu na direção do eixo y, cuja resolução espacial seguiu a mesma do eixo x. As figuras 4.3 e 4.4 apresentam o posicionamento da amostra e a malha para 64 células.



Figura 4.3: Domínio computacional da amostra de espuma mostrando a malha numérica para resolução de 64 células no eixo x.

Realizamos diversos testes para obtermos a queima do material em cada malha numérica do FDS. Os arquivos de saída do FDS contendo os dados de temperatura na malha numérica em função do tempo foram processados por um programa por nós desenvolvido, que os convertia em dados numéricos puros. O arquivo resultante era então processado por um programa em FORTRAN que identificava dos dados brutos de temperatura a posição da frente de fogo, definida em termos de uma temperatura crítica T_c . O espaçamento entre as várias frentes de fogo em termos do intervalo de tempo entre elas foi também variado.

Para as simulações com o FDS, utilizamos dois tipos de condição inicial, correspondendo à região submetida ao queimador: condição inicial pontual (pequeno conjunto de células centrado em y = 0) e linear (todas as células em y = 0). Para o ajuste da equação KPZ consideramos apenas as frentes de fogo que se destacam completamente da malha em y = 0. Essa frente de fogo é então tomada como condição inicial para a equação KPZ. O ajuste desta última é feito minimizando o erro quadrático em (2.32) da diferença entre a frente de onda simulada e a obtida resolvendo numericamente a equação KPZ. Dessa forma, o erro é função dos parâmetros c, $\nu \in \lambda$ e pode ser minimizado utilizando um algoritmo numérico apropriado. Neste trabalho utilizamos o algoritmo simplex [15], pelas razões expostas no capítulo 2.

Os resultados da modelagem da frente de fogo por meio da equação KPZ para uma malha de 32 células são mostrados na figura 4.5. O fogo foi iniciado com um queimador pontual, no centro da borda inferior da amostra no gráfico da esquerda. Do lado direito temos um fogo iniciado por um queimador que preenche toda a primeira linha de células. Podemos, portanto, observar que a abordagem proposta funciona para diferentes condições iniciais da frente de fogo. A figura 4.6 mostra os resultados do ajuste para uma malha de 64 células com diferentes condições iniciais de queima.

A modelagem da equação KPZ pode ser feita a partir de poucas interfaces. Fizemos ajustes com boa acurácia utilizando cinco e três interfaces para a malha de 32 células, conforme mostrado na figura 4.7. Podemos comprovar nas figuras 4.8 e 4.9 que o ajuste funciona bem para poucas interfaces e com diferentes resoluções espaciais. Na primeira figura apresentamos o caso de 64 células na direção x, que foi ajustada usando seis e três interfaces. Na figura 4.9 expomos o ajuste para 80 células com nove e quatro interfaces. É importante notar que não se faz necessário um grande número de células, ou seja, alta resolução espacial para que o ajuste seja razoável. A figura 4.10 mostra os gráficos dos ajustes para diferentes malhas numéricas de 32, 64, 80 e 128 células.

A tabela 4.1 mostra os valores obtidos para os parâmetros da equação KPZ $c, \nu, \lambda \in D$. Na tabela, N_x é o número de células na direção x, CI designa a condição inicial do queimador, sendo P para pontual e L para linear. O número de interfaces usadas para realizar o ajuste é designado na coluna NI e Δt é o espaçamento médio de tempo entre duas frentes de fogo. O erro, dado pela equação (2.32), é descrito na coluna \mathcal{E} . Salientamos que usamos condição de contorno periódica em nosso método, o que introduz um erro adicional ao modelamento, visto que em alguns casos a frente de fogo "experimental" não satisfaz exatamente essa condição. No entanto, os resultados do ajuste permanecem plenamente satisfatórios.



Figura 4.4: Domínio computacional da amostra de espuma em relação aos eixos coordenados.



Figura 4.5: Ajuste da equação KPZ para malha de 32 células com queimador pontual (esq.) e com queimador linear.



Figura 4.6: Ajuste da equação KPZ para malha de 64 células com queimador pontual (esq.) e com queimador linear.



Figura 4.7: Ajuste da equação KPZ para malha de 32 células com queimador linear e poucas interfaces para o ajuste.



Figura 4.8: Ajuste da equação KPZ para malha de 64 células com queimador linear e poucas interfaces para o ajuste.



Figura 4.9: Ajuste da equação KPZ para malha de 80 células com queimador linear e poucas interfaces para o ajuste.



Figura 4.10: Ajuste da equação KPZ para diferentes malhas numéricas. Da esquerda para a direita: 32, 64, 80 e 128 células.

T 1 1 4	1	D 1/ 1	1 . • 1		• ,	1	~	
Tabela 4	1.	Resultados	obtidos	nara (o aniste	da	equiação	KPZ
Tabela 1	• • •	resultados	obliquos	para	o ajusic	ua	cquação	171 77.

N_x	CI	NI	с	ν	λ	D	${\cal E}$ (m)	Δt (s)
32	Р	10	$1,015 \cdot 10^{-2}$	$3,589\cdot10^{-5}$	$1,079\cdot10^{-3}$	$2,541 \cdot 10^{-3}$	$2,735 \cdot 10^{-2}$	5
32	Р	5	$8,923\cdot10^{-3}$	$2,825\cdot10^{-5}$	$4,631\cdot10^{-4}$	$5,305 \cdot 10^{-4}$	$2,306\cdot 10^{-2}$	10
64	Р	8	$2,432 \cdot 10^{-2}$	$7,279\cdot10^{-5}$	$4,733 \cdot 10^{-3}$	$0,\!378$	$2,903 \cdot 10^{-2}$	5
64	Р	4	$2,089\cdot 10^{-2}$	$6,890 \cdot 10^{-5}$	$4,111 \cdot 10^{-3}$	$0,\!616$	$4,489\cdot 10^{-2}$	10
32	L	5	$8,960 \cdot 10^{-3}$	$3,206\cdot10^{-5}$	$2,427\cdot10^{-3}$	$3,332 \cdot 10^{-2}$	$2,374\cdot 10^{-2}$	10
32	L	10	$8,959 \cdot 10^{-3}$	$3,108\cdot10^{-5}$	$1,888\cdot 10^{-3}$	$3,571\cdot 10^{-2}$	$2,037\cdot 10^{-2}$	20
64	L	6	$8,951 \cdot 10^{-3}$	$1,177\cdot 10^{-5}$	$1,075 \cdot 10^{-4}$	$4,321 \cdot 10^{-5}$	$3,949 \cdot 10^{-2}$	20
64	L	3	$8,960 \cdot 10^{-3}$	$1,362\cdot10^{-5}$	$5,701 \cdot 10^{-4}$	$2,291 \cdot 10^{-2}$	$2,756\cdot 10^{-2}$	40
80	L	9	$4,998\cdot 10^{-3}$	$5,757 \cdot 10^{-6}$	$2,797 \cdot 10^{-4}$	$1,043 \cdot 10^{-4}$	$3,115\cdot 10^{-2}$	6
80	L	4	$3,456\cdot 10^{-3}$	$1,660\cdot 10^{-4}$	$5,144 \cdot 10^{-4}$	$2,131 \cdot 10^{-2}$	$4,510\cdot 10^{-2}$	12
128	L	5	$5,087\cdot 10^{-3}$	$4,226\cdot10^{-5}$	$3,194 \cdot 10^{-6}$	$3,783 \cdot 10^{-3}$	$1,488\cdot 10^{-2}$	4

Capítulo 5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

5.1 CONCLUSÕES

A modelagem da equação KPZ desenvolvida para esta pesquisa mostrouse efetiva. É possível encontrar os parâmetros da equação que descreve a evolução do incêndio a partir de poucas frentes de fogo. Essa característica é de relevante importância para aplicação em casos reais de queimadas. Numa queimada não haverá como obter dados refinados da posição da frente, por isso nossa abordagem apresenta vantagens em conseguir obter bons ajustes a partir de poucos dados da frente de fogo.

O ajuste da equação KPZ ora apresentado tem particularmente condições de ser aplicado para prevenção e perícia de incêndios. Durante um incêndio florestal, podem ser feitas fotos aéreas e demarcadas as posições da frente de fogo. Com o tratamento dessas imagens, são extraídos os dados necessários para a realização da modelagem. Em seguida, é permitida a evolução da equação e encontrada a nova posição da frente, se mantidas as condições iniciais. Essa informação possibilita a adoção de estratégias para prevenir o avanço do fogo por parte das equipes de intervenção. Outra aplicação importante é a utilização da modelagem para regredir a frente de fogo e encontrar as condições iniciais de queima, isto é, a zona de origem do fogo. Essa ferramenta, portanto, pode ser usada subsidiariamente na investigação de incêndios.

5.2 PERSPECTIVAS PARA PESQUISAS FUTURAS

A linha de pesquisa atual abre caminho para diversos outros trabalhos correlacionados. A modelagem da equação KPZ pode ser testada no ajuste de frentes de fogo observadas experimentalmente. Uma outra linha a ser seguida é a análise de como os parâmetros c, ν , λ e D estão relacionados com os fatores que modificam o comportamento do fogo, tais como vento e inclinação do terreno. Além disso, pode-se ampliar o estudo da equação KPZ para mais dimensões. Assim, será possível descrever a evolução de incêndios com fontes pontuais não necessariamente locadas numa borda do objeto queimado. Ou seja, o ajuste com a equação KPZ em duas dimensões permite a descrição da queima superficial que se propague circularmente a partir do foco de incêndio. O estudo da classe de universalidade e do comportamento dos parâmetros de escala do fenômeno de propagação superficial de frentes de fogo é uma possibilidade de pesquisa futura. Um método direto e bastante usado para determinação da classe de universalidade à qual o processo de crescimento da interface pertence é calcular os expoentes dinâmicos e compará-los com aqueles obtidos analítica ou numericamente para modelos conhecidos.

Referências Bibliográficas

- B. Karlsson and J. G. Quintiere. *Enclosure fire dynamics*. CRC Press LLC, USA, 2000.
- [2] M. Kardar, G. Parisi, and Y.-C. Zhang. Dynamic scaling of growing interfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 56(9):889, 1986.
- [3] K. McGrattan, H. Baum, R. Rehm, S. Hostikka, and J. Floyd. Fire Dynamics Simulator (version 5) Technical Reference Guide. NIST, Washington, 2008.
- [4] C.-H. Lam and L. M. Sander. Inverse method for interface problems. Phys. Rev. Lett., 71(4):561, 1993.
- [5] A. Giacometti and M. Rossi. Interface dynamics from experimental data. *Phys. Rev. E*, 62(2):1716, 2000.
- [6] N. G. van Kampen. Stochastic processes in physics and chemistry. North-Holland, Amsterdan, 1990.
- [7] A.-L. Barabasi and H. E. Stanley. Fractal concepts in surface growth. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [8] K. Huang. Statistical mechanics. IE-Wiley, New York, 1987.
- [9] D. Foster, D.R. Nelson, and M. J. Stephen. Large-distance and long time properties of a randomly stirred fluid. *Phys. Rev. A*, 16(2):732, 1977.
- [10] J. Maunuksela, M. Myllys, O.-P. Kähkönen, J. Timonen, N. Provatas, M. J. Alava, and T. Ala-Nissila. Kinetic roughening in slow combustion of paper. *Phys. Rev. Lett.*, 79(8):1515, 1997.
- [11] C.-H. Lam and F. G. Shin. Improved discretization of the kardar-parisi-zhang equation. *Phys. Rev. E*, 58(5):5592, 1998.
- [12] C.-H. Lam and F. G. Shin. Anomaly in numerical integrations of the kardar-parisizhang equation. *Phys. Rev. E*, 57(6):6506, 1998.

- [13] J. Maunuksela, M. Myllys, J. Merikoski, J. Timonen, T. Kärkkäinen, M.S. Welling, and R. J. Wijngaarden. Determination of the stochastic evolution equation from noisy experimental data. *Eur. Phys. J. B*, 33:193, 2003.
- [14] A. Giacometti and M. Rossi. Pseudospectral approach to inverse problems in interface dynamics. *Phys. Rev. E*, 63:046102, 2001.
- [15] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. Numerical Recipes. Cambridge University Press, Cambridge, 2nd edition, 1992.
- [16] A. S. Werneck, T. M. Roha Filho, and L. E. Dardenne. General methodology to optimize damping functions to account for charge penetration effects in electrostatic calculations using multicentered multipolar expansions. J. Phys. Chem. A, 112(2):268, 2008.
- [17] J. G. Quintiere. *Principles of fire behavior*. Delmar Publishers, USA, 1997.
- [18] Corpo de Bombeiros Militar do Distrito Federal. Manual básico de combate a incêndio. CBMDF, Brasília, 2006.
- [19] D. Drysdale. An introduction to fire dynamics. John Wiley & Sons Ltd., England, 2nd edition, 1998.
- [20] D. I. Lawson and D. L. Simms. The ignition of wood by radiation. British Journal of Applied Physics, 3(9):288, 1952.
- [21] A. Tewarson and R. F. Pion. Flammability of plastics-i. burning intensity. Combustion and Flame, 26:85, 1976.
- [22] G. P. Forney and W. F. Moss. Analyzing and exploiting numerical characteristics of zone fire models. *Fire Science & Technology*, 14(1):49, 1994.
- [23] W. K. Chow and L. Meng. Analysis of key equations in a two-layer zone model and application with simbolic mathematics in fire safety engineering. *Journal of fire sciences*, 22:97, 2004.
- [24] K. McGrattan, editor. Fire Dynamics Simulator (version 4) Technical Reference Guide. NIST, Washington, 2006.
- [25] J. C. Tannehill, A. Anderson, and R. H. Pletcher. An introduction to fire dynamics. Taylor & Francis, USA, 2nd edition, 1997.

- [26] R. G. Rehm and H. R. Baum. The equations of motion for thermally driven buoyant flows. Journal of Research of the National Bureau of Standards, 83(3):297, 1978.
- [27] K. McGrattan, B. Klein, S. Hostikka, and J. Floyd. Fire Dynamics Simulator (version 5) User's Guide. NIST, Washington, 2008.