

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

MODELAGEM DA RADIAÇÃO TÉRMICA CONSIDERANDO A INJEÇÃO DE
FULIGEM EM UMA CÂMARA DE COMBUSTÃO OPERANDO COM CHAMA
TURBULENTA DE METANO

por

Gilberto Maurer

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, abril de 2015

MODELAGEM DA RADIAÇÃO TÉRMICA CONSIDERANDO A INJEÇÃO DE
FULIGEM EM UMA CÂMARA DE COMBUSTÃO OPERANDO COM CHAMA
TURBULENTA DE METANO

por

Gilberto Maurer
Engenheiro Mecânico

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

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Aprovado por:

Prof. Dr. Cristiano Vitorino da Silva, URI-Erechim

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira, UFRGS

Prof. Dr. Horácio Antônio Vielmo, UFRGS

Prof. Dr. Luiz Alberto Oliveira Rocha
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 27 de abril de 2015

RESUMO

O presente trabalho simula numericamente os efeitos na transferência de calor radiativa a partir da injeção de fuligem no interior de uma câmara cilíndrica que opera com chama turbulenta. São resolvidas equações de conservação de massa, de energia, de quantidade de movimento, da variância da flutuação de temperatura, de espécies químicas gasosas e de fuligem para um problema físico conhecido, partindo da combustão da mistura de metano e ar dentro de uma câmara com dimensões e condições de contorno já exploradas em outros trabalhos a fim de possibilitar comparações de resultados. Para a turbulência é utilizado o modelo $k-\varepsilon$ padrão. Na modelagem das interações turbulência-radiação, é considerada a correlação combinada entre coeficiente de absorção e temperatura e a autocorrelação de temperatura. Foram adotados os modelos de *Eddy Break-Up* – Arrhenius para a combustão, utilizando a reação de combustão em duas etapas. O método de ordenadas discretas, considerando a soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG – do inglês: *weighted-sum-of-gray-gases*) é utilizado para calcular o termo fonte de calor radiativo. A dependência espectral das propriedades radiativas do meio participante foi modelada pelo método WSGG, que permite a solução de problemas com concentração variável das espécies participantes com alto nível de confiabilidade. A simulação da injeção de fuligem foi realizada alterando as condições de contorno do problema, resolvendo-se os cálculos de forma acoplada. Os resultados obtidos após a injeção externa da fuligem foram comparados com simulações que apenas consideravam a formação natural e a posterior oxidação das partículas. Foram analisados os campos do termo fonte de calor radiante em toda a câmara, que mostraram aumento sensível da radiação após a injeção ser considerada. Comparou-se também o fluxo de calor que atinge as paredes da câmara, como principal análise do presente trabalho, indicando que mesmo injetando pequenas quantidades de fuligem, há um aumento no fluxo de calor. O campo de temperatura não apresentou alterações consideráveis, apenas reduzindo-se a temperatura máxima no interior da câmara. De uma forma geral, o efeito da fuligem é mais significativo nas regiões de alta temperatura.

Palavras-chave: Injeção de Fuligem, Radiação, Meios Participantes, Combustão de Metano, WSGG.

ABSTRACT

This work simulates numerically the effects on radiative heat transfer after the soot injection into a cylindrical combustion chamber that operates with turbulent flames. A known physical problem of burning methane with air inside a chamber is considered. The dimensions and boundary conditions were already considered in other papers to enable comparisons between the results. Conservation equations for mass, momentum, gaseous chemical species and soot, energy, and temperature variance equations, are solved. The turbulence is modeled by standard $k-\varepsilon$ model. Consideration of TRI (Turbulence-Radiation Interactions) effects is made through a methodology that considers both cross-correlation between absorption coefficient and temperature self correlation. The combustion model is Eddy Break-Up – Arrhenius, with two steps for the combustion reaction. The radiative heat source term is calculated with the discrete ordinates method, considering the weighted-sum-of-gray-gases model (WSGG). The spectral dependence of the participating media radiative properties was modeled by WSGG method, which allows the solution of problems with varying concentration of the participating species with high level of reliability. The simulation of soot injection was performed by changing the contour conditions of the problem. The calculation was solved in a coupled way. The results obtained after foreign soot injection were compared with simulations which only considered the natural formation and subsequent oxidation of the particles. The fields of the radiative heat source term showed significant increase of radiation after the soot injection was considered. The radiative heat flow that reaches the chamber walls is compared between the cases, as one of the main analysis of this work. It indicates that even when small amounts of soot injection are considered, there is an increase in the radiative heat flow to the walls. The temperature behavior showed no significant change, except on reducing the maximum temperature within the chamber. In general, the effects on the radiative heat transfer after the soot injection are greater in the high temperature areas.

Keywords: Soot injection, Radiation, Participating Media, Methane Combustion, WSGG.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Motivação	1
1.2	Revisão bibliográfica	2
1.3	Objetivos e contribuição deste trabalho	12
1.4	Organização do trabalho	12
2	MODELAGEM MATEMÁTICA DO PROCESSO DE COMBUSTÃO TURBULENTA DE GASES EM CÂMARAS CILÍNDRICAS	14
2.1	Modelagem clássica da turbulência	15
2.2	Conservação de massa	17
2.3	Conservação de energia	17
2.4	Conservação de quantidade de movimento	19
2.5	Modelagem matemática da turbulência	20
2.6	Conservação das espécies químicas	23
2.6.1	Modelo de formação e oxidação de fuligem	25
2.6.2	Injeção externa de fuligem	27
3	MODELAGEM NUMÉRICA DA RADIAÇÃO TÉRMICA	29
3.1	Poder emissivo e intensidade de radiação do corpo negro	30
3.2	Intensidade de radiação de superfícies reais em meios transparentes	31
3.3	Intensidade de radiação em meios participantes	33
3.3.1	Absorção e espalhamento	33
3.3.2	Emissão	37
3.3.3	Segundo efeito do espalhamento: o aumento da intensidade de radiação	38
3.3.4	Equação de transferência radiativa (RTE)	40
3.4	Modelo da soma ponderada de gases cinza	41
3.5	Avaliação das características radiantes da fuligem	44
3.6	Interações Turbulência-Radiação	46
4	APRESENTAÇÃO DO PROBLEMA FÍSICO	50
4.1	Câmara de combustão cilíndrica axissimétrica	50
4.2	Condições de contorno	52

4.3	Propriedades termofísicas	53
5	MÉTODOS NUMÉRICOS E AVALIAÇÃO DA MODELAGEM	
	MATEMÁTICA	55
5.1	Método de volumes finitos	56
5.2	Métodos das ordenadas discretas	61
5.3	Independência de malha	68
5.4	Avaliação do modelamento com base no balanço de energia	69
6	RESULTADOS	71
6.1	Injeção de fuligem junto ao ar de combustão	71
6.2	Avaliação da influência da fuligem na região final da câmara	81
7	CONCLUSÕES	84
7.1	Sugestões de trabalhos futuros	86
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	87

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Intensidade de radiação incidente em uma área dA_I , a partir de uma fonte em dA_s [Siegel e Howell, 2002]	31
Figura 3.2	Intensidade de radiação espectral que incide sobre um elemento de volume que absorve e espalha	34
Figura 3.3	Aumento de intensidade de radiação devido à emissão em um meio participante [Centeno, 2014, adaptado de Siegel e Howell, 2002]	38
Figura 3.4	Espalhamento de energia para dentro da direção S [Siegel e Howell, 2002]	38
Figura 3.5	Parte do espectro de absorção de 100% de água a 1000K [adaptado de Galarça et al., 2008]	41
Figura 4.1	Esquema de representação física da câmara de combustão em estudo ...	50
Figura 5.1	Situação bidimensional do volume de controle genérico e seus vizinhos	57
Figura 5.2	Sistemas espacial e direcional de coordenadas para geometria cilíndrica [adaptado de Menart, 2000]	65
Figura 5.3	Volume de controle e cossenos diretores para os cálculos DOM [Centeno, 2014]	66
Figura 5.4	Malha com 48×140 volumes utilizada nos cálculos	69
Figura 6.1	Campos de frações volumétricas de fuligem considerando: (a) formação e oxidação natural da fuligem, sem injeção externa; (b) injeção da fração mássica de 1×10^{-3} de fuligem (equivalente à 6×10^{-7} em fração volumétrica), desconsiderando a sua oxidação para $T < 1000$ K; (c) injeção da fração mássica de 1×10^{-3} de fuligem e $FM = 2\%$ para $T < 1000$ K; (d) injeção da fração mássica de 1×10^{-3} de fuligem e $FM = 5\%$ para $T < 1000$ K; (e) injeção da fração mássica de 2×10^{-3} de fuligem (equivalente à $1,2 \times 10^{-6}$ em fração volumétrica) e $FM = 2\%$ para $T < 1000$ K; (f) injeção da fração mássica de 2×10^{-3} de fuligem e $FM = 5\%$ para $T < 1000$ K	72
Figura 6.2	Campos de termo fonte de calor radiante considerando: (a) formação e oxidação natural da fuligem, sem injeção externa; (b) injeção da fração mássica de 1×10^{-3} de fuligem, desconsiderando a sua oxidação para T	

	< 1000 K; (c) injeção da fração mássica de 1×10^{-3} de fuligem e $FM = 2\%$ para $T < 1000$ K; (d) injeção da fração mássica de 1×10^{-3} de fuligem e $FM = 5\%$ para $T < 1000$ K; (e) injeção da fração mássica de 2×10^{-3} de fuligem e $FM = 2\%$ para $T < 1000$ K; (f) injeção da fração mássica de 2×10^{-3} de fuligem e $FM = 5\%$ para $T < 1000$ K	74
Figura 6.3	Fluxo de calor radiativo sobre a parede radial da câmara de combustão	76
Figura 6.4	Campos de temperatura considerando: (a) formação e oxidação natural da fuligem, sem injeção externa; (e) injeção da fração mássica de 2×10^{-3} de fuligem e $FM = 2\%$ para $T < 1000$ K	78
Figura 6.5	Perfil de temperatura ao longo da direção axial	79
Figura 6.6	Perfil de fração volumétrica de fuligem ao longo da direção axial.....	80
Figura 6.7	Perfil do termo fonte de calor radiante ao longo da direção axial	81
Figura 6.8	Distribuição do número de Damköler.	82
Figura 6.9	Fluxo de calor radiativo sobre a parede radial da câmara de combustão	83
Figura 6.10	Sugestão esquemática que representa uma das possibilidades de se injetar fuligem na região quente da câmara de combustão	84

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1	Coeficientes do modelo WSGG para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ [Dorigon et al., 2013]	43
Tabela 3.2	Coeficientes do modelo WSGG para fuligem [Cassol, 2013]	46
Tabela 4.1	Entalpia molar de formação padrão a 298,15 K e 1 atm [Turns, 2000] ..	54
Tabela 4.2	Parâmetros de cada reação para cálculo da taxa pelo modelo de Arrhenius [Turns, 2000]	54
Tabela 5.1	Identificação da variável genérica, ϕ , coeficiente difusivo, Γ_ϕ , e termos fontes, $\overline{S^\phi}$, das equações de conservação que modelam o processo de combustão turbulenta [adaptado de Centeno, 2014]	59
Tabela 5.2	Cossenos diretores para a aproximação S_ϕ para geometria bidimensional	64
Tabela 5.3	Índice de convergência de malha para as variáveis: fração radiativa, temperatura máxima e frações molares máximas de CO ₂ e H ₂ O	68
Tabela 5.4	Análise do balanço de energia na câmara de combustão	70
Tabela 6.1	Taxa líquida de transferência radiativa e da fração radiativa	75
Tabela 6.2	Porcentagem média de aumento no fluxo transmitido às paredes de $0,3 \text{ m} < z < 1,2 \text{ m}$, para diferentes quantidades de fração mássica de fuligem injetadas e diferentes considerações do modelo de oxidação	77

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ALB	função distribuição das linhas de absorção do corpo negro
CDSB	bancos de dados espectrais para o CO ₂ em alta temperatura
CFD	dinâmica de fluidos computacional
CMC	modelo <i>Conditional Moment Closure</i>
CW	modelo do número de onda cumulativo
DNS	simulação numérica direta
DOM	método de ordenadas discretas
DTRM	método de transferência discreta de radiação
E-A	modelo <i>Eddy Break-Up</i> – Arrhenius
EBU	modelo <i>Eddy Break-Up</i>
EDC	modelo <i>Eddy Dissipation Concept</i>
EDM	modelo <i>Eddy Dissipation Model</i>
RTE	equação de transferência radiativa
EWBM	modelo exponencial de banda larga
FM	fator multiplicador
FDS	software para simulação de incêndios
FSCk	modelo do <i>k</i> -correlacionado baseado em todo o espectro
FSK	modelo da distribuição- <i>k</i> que considera todo o espectro
GC	modelo de gás cinza
GCI	índice de convergência de malha
GN	gás natural
HITEMP	banco de dados espectrais (para as espécies H ₂ O, CO ₂ , CO, NO e OH) obtidos em alta temperatura
HITRAN	banco de dados espectrais (39 espécies) obtidos em temperatura ambiente
LBL	linha-por-linha
LES	simulação de grandes escalas
MSI	do inglês: <i>Modified Strongly Implicit</i>
NGL	número de graus de liberdade
OTFA	aproximação da flutuação opticamente fina
PDF	função densidade de probabilidade

QUICK	esquema de interpolação quadrático para os termos advectivos
RANS	modelagem clássica da turbulência com médias de Reynolds
rms	do inglês: <i>root mean square</i>
RTE	do inglês: <i>radiative transfer equation</i>
RSM	modelo de transporte das tensões de Reynolds
SIMPLE	método semi-implícito para acoplamento pressão-velocidade
SLW	modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza baseado em linhas espectrais
SNB	modelo estatístico de banda estreita
SNBCK	modelo do k -correlacionado baseado no modelo SNB
SOR	do inglês: <i>Sucessive Over Relaxation</i>
TDMA	algoritmo para solução de matrizes tri-diagonais
TRI	interações turbulência-radiação
WSGG	modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza

LISTA DE SÍMBOLOS

A	fator pré-exponencial na equação de Arrhenius, $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{kmol}^{-1}$
A	área, m^2
A_r, A_s, A_o, S	parâmetros do método DOM
a_j	coeficiente de ponderação do gás j no modelo WSGG
a_P, a_N, a_S, a_L, a_O	coeficientes dos volumes P, N, S, L e O
B	termo fonte no método de volumes finitos
b_j	coeficiente polinomial no modelo WSGG
C	seção-transversal de absorção, $\text{cm}^2 \cdot \text{molécula}^{-1}$
\bar{c}	concentração molar, $\text{kmol} \cdot \text{m}^{-3}$
CH_4	Metano
c_0	velocidade da luz no vácuo, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
$c_0, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5$	coeficientes polinomiais no modelo GC
$C_{\mu}, C_{1,\varepsilon}, C_{2,\varepsilon}$	constantes do modelo $k-\varepsilon$
CO	monóxido de carbono
CO_2	dióxido de carbono
c_p	calor específico a pressão constante, $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
C_T	constante do modelo de cálculo das interações TRI
C_{TRI1}	constante do modelo de cálculo das interações TRI
C_{TRI2}	constante do modelo de cálculo das interações TRI
C_s	constante no modelo de Khan e Greeves
D	coeficiente de difusão, $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
D	condutância difusiva nas faces dos volumes de controle, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$
D	diâmetro, m
dA	elemento de área, m^2
dV	elemento de volume, m^3
$d\omega$	elemento de ângulo sólido, sr
<i>desvio%</i>	desvio relativo percentual entre resultados distintos
E	poder emissivo, $\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$
E	energia de ativação na equação de Arrhenius, $\text{kJ} \cdot \text{kmol}^{-1}$
<i>erro %</i>	erro relativo percentual entre resultados distintos

F	fluxo difusivo por unidade de massa nas faces dos volumes de controle, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$
f_1, f_2	solução para malha 1 e 2, no cálculo do GCI
f_{rad}	fração radiativa, %
F_s	fator de segurança no cálculo do GCI
f_v	fração volumétrica
h	entalpia, $\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$
h	constante universal de Planck, $\text{J}\cdot\text{s}$
h^0	entalpia de formação na temperatura de referência, $\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$
\bar{h}^0	entalpia molar de formação na temperatura de referência, $\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$
H_2O	vapor d'água
I	intensidade de radiação, $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{sr}^{-1}$
IT	intensidade de turbulência, %
J	fluxo total da variável genérica ϕ
K	coeficiente de extinção, m^{-1}
K_1, K_2	constantes do modelo <i>Eddy Break-Up</i>
k	condutividade térmica, $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
k	energia cinética turbulenta, $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-2}$
k	constante universal de Boltzmann, $\text{J}\cdot\text{K}^{-1}$
L	volume à direita do volume P
l	fronteira leste do volume P
l	comprimento característico da escala de turbulência, m
M	quantidade total de direções ordenadas
M	massa, kg
MM	massa molecular, $\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$
N	volume acima do volume P
n	fronteira norte do volume P
n	coeficiente de dependência da temperatura, adimensional
N_2	Nitrogênio
N_G	número de gases cinza considerados no modelo WSGG
N_L	número de Loschmidt, $\text{moléculas}\cdot\text{cm}^{-3}\cdot\text{atm}^{-1}$
Nu	número de Nusselt [$hL\cdot k^{-1}$]
O	volume à esquerda do volume P

O	fronteira oeste do volume P
O_2	oxigênio
P	ponto central do volume de controle
P	pressão, Pa
P	pressão parcial, Pa ou atm
P	ordem de convergência utilizada no cálculo do GCI
p^*	pressão modificada, Pa
Pe	número de Peclet [$VL \cdot \alpha^{-1}$]
p_{CO_2}	pressão parcial de CO_2 , atm
p_{H_2O}	pressão parcial de H_2O , atm
P_k	termo de produção ou dissipação da energia cinética turbulenta, $W \cdot m^{-3}$
Pr	número de Prandtl [$c_p \mu \cdot k^{-1}$]
Pr_t	número de Prandtl turbulento
p_s	pressão parcial da espécie participante, atm
pS	produto da pressão pelo caminho, atm·m
Q	taxa de energia, W
Q	fluxo de calor, $W \cdot m^{-2}$
R	constante universal dos gases, $kJ \cdot kmol^{-1} \cdot K^{-1}$
R	taxa líquida de reação, $kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$
R	direção radial, m
R	expoente da razão de equivalência no modelo de Khan e Greeves
R	razão entre o número de volumes utilizada no cálculo do GCI
Re	número de Reynolds [$\rho VL \cdot \mu^{-1}$]
S	distância ou posição espacial, m
S	volume abaixo do volume P
S	direção de um feixe
S	fronteira sul do volume P
S	seção-transversal de espalhamento, $m^2 \cdot partícula^{-1}$
Sc	número de Schmidt [$\nu \cdot D^{-1}$]
Sc_t	número de Schmidt turbulento
\dot{S}_ϕ	termo fonte genérico da equação de conservação da variável ϕ

\bar{S}^h	termo fonte da equação da conservação de energia, $W \cdot m^{-3}$
S_{ij}	intensidade da linha de absorção, $cm^2 \cdot molécula^{-1}$
S_{rad}	termo fonte de calor radiativo, $W \cdot m^{-3}$
S_{rea}	termo fonte das reações químicas, $W \cdot m^{-3}$
T	temperatura, K
T_{bulk}	temperatura de mistura, K
T'^2	variância da flutuação da temperatura, K^2
u	velocidade axial, $m \cdot s^{-1}$
u^+	velocidade característica adimensional
u^*	velocidade de fricção, $m \cdot s^{-1}$
V	volume, m^3
v	velocidade radial, $m \cdot s^{-1}$
w	pesos das quadraturas no método DOM
w	velocidade angular, $m \cdot s^{-1}$
\bar{x}	fração molar, $kmol_\alpha \cdot kmol_{tot}^{-1}$
y	direção normal à superfície, m
y^+	dimensão característica adimensional
y_α	fração mássica da espécie α , $kg_\alpha \cdot kg_{tot}^{-1}$
z	direção axial, m

Símbolos Gregos e Demais Símbolos

α	parâmetro no método DOM
β	expoente da temperatura na equação de Arrhenius
β	constante do modelo de propriedades espectrais da fuligem
Δr	dimensão do volume de controle na direção radial
$\Delta r_N, \Delta r_S$	distância radial entre o ponto P e os pontos N e S
ΔT	variação de temperatura, K
Δz	dimensão do volume de controle na direção axial
$\Delta z_L, \Delta z_O$	distância axial entre o ponto P e os pontos L e O
ε	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, $m^2 \cdot s^{-3}$

E	emissividade ou emitância, adimensional
ε_{12}	erro relativo entre as malhas 1 e 2, no cálculo do GCI
Φ	razão de equivalência
Φ	variável genérica
ϕ, ψ	ângulos para posicionar a direção discreta o método DOM
Φ	função de fase
Γ	meia largura da linha de absorção, $\text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$
Γ	expoente da concentração molar na equação de Arrhenius
$\gamma_{ar,i}$	meia largura devido ao ar, $\text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$
γ_c	meia largura para o alargamento por colisão, $\text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$
γ_i	meia largura da linha de absorção i do banco de dados espectrais, $\text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$
$\gamma_{self,i}$	meia largura devido à própria molécula, $\text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$
Γ_ϕ	coeficiente difusivo da variável ϕ , $\text{Ns} \cdot \text{m}^{-2}$
Γ_T	coeficiente de difusividade térmica, $\text{Ns} \cdot \text{m}^{-2}$
H	coeficiente estequiométrico
H	número de onda, cm^{-1}
Φ	ângulo azimutal, rad
K	coeficiente de absorção, m^{-1}
κ_j	coeficiente de absorção do gás j no modelo WSGG
A	constante de proporcionalidade de Nikuradse
μ_m, ξ_m, ζ_m	cossenos diretores no método DOM
M	viscosidade dinâmica, $\text{Ns} \cdot \text{m}^{-2}$
μ_t	viscosidade turbulenta, $\text{Ns} \cdot \text{m}^{-2}$
N	viscosidade cinemática, $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Θ	ângulo polar, rad
P	massa específica, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
Σ	coeficiente de espalhamento, m^{-1}
Σ	constante de Stefan-Boltzmann, $\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$
σ_ε	número de Prandtl para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
σ_k	número de Prandtl para a energia cinética turbulenta
τ_w	tensão cisalhante na parede, Pa
T	espessura óptica

ω	ângulo sólido, sr
Ψ	constante de ajuste de Nikuradse
ζ	fator de interpolação no método DOM
χ	variável utilizada para verificação de convergência assintótica no GCI

Super-índices

'	termo de flutuação temporal
'	radiação incidente
-	termo médio temporal

Sub-índices

a	energia absorvida
α	cada espécie química na câmara
α^*	espécie reagente no modelo <i>Eddy Break-Up</i>
CN	condição para o corpo negro
$comb$	Combustível
$com TRI, sem TRI$	cálculos incluindo e desprezando as interações TRI
e	energia emitida
ent	condição na entrada
$form$	formação de fuligem
g	condição para a mistura gasosa
η	dependência espectral com relação ao número de onda
i	posição espectral
i	radiação incidente
ij	posição espectral correspondente à transição de nível energético i-j
j	cada gás cinza no modelo WSGG
k	cada reação química em que a espécie α participa
LBL	cálculo linha-por-linha
M	coeficientes K , κ e σ por unidade de massa específica
M	cada direção discreta no método DOM

m, n	cada gás cinza no modelo WSGG na mistura de gás (m) e fuligem (n)
$máx$	valor máximo
n, s, l, o	fronteiras norte, sul, leste e oeste do volume de controle
N	ordem da aproximação no método DOM
ox	Oxidante
$oxid$	oxidação de fuligem
P	coeficientes K, κ e σ por unidade de pressão parcial
P	produtos da combustão no modelo <i>Eddy Break-Up</i>
R	direção radial
rad	Radiação
rea	reações químicas
ref	condição de referência
S	Espalhamento
S	Fuligem
TRI	interações turbulência-radiação
W	referente à parede
Z	direção axial

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

A fuligem costuma ser normalmente tratada como um contaminante atmosférico, devido às suas características nocivas ao ser humano, quando por ele inalada, e por ser associada a processos ineficientes de combustão, seja através da queima incompleta do combustível ou por temperaturas altas durante o processo de queima. Porém, esta percepção está associada à fuligem que não é completamente consumida durante a combustão e acaba sendo expelida junto aos gases na saída. Em uma análise mais detalhada da combustão, é possível verificar a importância que a formação e a oxidação da fuligem tem para a manutenção da chama e também para possibilitar uma troca eficiente de calor.

Durante o processo de combustão, a energia emitida pela fuligem possui a função de arrefecer a chama, aumentando o fluxo de calor que é transportado para as paredes da câmara, ou para o meio externo. Parte da energia que é emitida também realimenta o processo, contribuindo para aumentar os níveis energéticos na região inicial de queima do combustível. Quando o objeto de estudo é uma câmara de combustão, o fluxo de calor nas paredes é diretamente relacionado à eficiência do equipamento. É a partir desse fluxo que a troca de calor com algum fluido é realizada, de acordo com o projeto do equipamento em questão, seja para o aproveitamento ou apenas para o resfriamento.

O estudo da eficiência no processo da combustão é impulsionado pela crescente demanda de energia. Estima-se que 91,8% da energia necessária para as atividades básicas da sociedade, como transporte, produção de energia elétrica e térmica, provém da queima de combustíveis [Key World Energy, 2014]. Ou seja, melhorar a eficiência dos processos de combustão, mesmo que em pequenos níveis, se equivale à proporção de outras fontes de energias na matriz energética.

Dentre os combustíveis utilizados em processos de combustão, o gás natural, formado em sua maior parte de metano é um dos mais difundidos. Sua queima produz pouca fuligem em relação aos demais combustíveis, principalmente devido à característica de possuir um maior teor de hidrogênio em sua composição. Logo, a injeção externa de fuligem representa uma ideia possível de ser explorada, para que não se tenha a perda de partículas para o meio ambiente, as condições para sua oxidação devem ser supridas.

As pesquisas experimentais realizadas por Pourhoseini et al., 2013, mostram que a

injeção externa de fuligem em câmaras de combustão é uma prática viável. Nesse trabalho, a fuligem é arrastada pelo próprio ar de combustão que entra na câmara. A formação natural da fuligem durante a queima depende de fatores como: tipo de combustível, proporção de mistura ar-combustível, temperatura da chama, entre outros. Porém, a injeção externa pode ser realizada independentemente dessas condições, necessitando apenas de um transporte pneumático. Seja através de uma linha de ar comprimido, ventiladores de alta pressão, ou mesmo de sopradores integrantes dos queimadores já instalados nas câmaras, todos estes métodos são capazes de arrastar partículas de fuligem para o interior da câmara de combustão quando um compartimento contendo o material é acoplado.

As partículas de fuligem podem ser consideradas como aglomerados de átomos de carbono, aproximadamente esféricos, de acordo com a microscopia eletrônica. Essas partículas são pequenas, possuindo tamanhos que variam de 0,005 μm à 0,08 μm , tendo 0,3 μm em casos extremos. Nas chamas, são normalmente encontradas em frações volumétricas de 10^{-7} a 10^{-4} . Segundo Modest, 2003, para se determinar as propriedades radiativas de uma nuvem de fuligem se faz necessário conhecer a quantidade, forma e distribuição da fuligem assim como suas propriedades ópticas, que dependem da composição química e características superficiais.

1.2 Revisão bibliográfica

O estudo da modelagem da radiação térmica tem sido explorado por diversos pesquisadores nas últimas décadas. Da mesma forma, diversos trabalhos sobre os processos de combustão são encontrados na literatura. Devido à grande complexidade de ambos os assuntos, muitos são os trabalhos sobre simplificações e comparações de modelos.

O efeito da formação e do consumo da fuligem na troca de calor radiante durante a combustão tem sido estudado recentemente com maior profundidade. Além de trabalhos que tratam da combustão e seus principais fenômenos, são também relacionadas pesquisas acerca da modelagem das interações TRI e da modelagem espectral do coeficiente de absorção, que influenciam também na transferência radiativa da fuligem.

Segundo Eaton et al., 1999, dados de câmaras de combustão de dimensões maiores são tipicamente limitados às medições dos seus efluentes. Dados em escalas menores podem fornecer informações mais precisas, porém possuem obtenção onerosa. Devido à complexidade da turbulência e dos processos associados à chama, torna-se extremamente

importante o desenvolvimento de metodologias de modelagem destes fenômenos, uma vez que torna viável a ligação entre testes de sub-escala e a operação de câmaras em grandes escalas de potência.

O processo de combustão no interior de uma fornalha retangular vertical foi solucionado por Robinson, em 1985. O autor representou o problema através de um conjunto de equações que incluía a conservação de energia, de massa, de quantidade de movimento, de espécies químicas, de energia cinética turbulenta e de sua dissipação. Para atingir o nível de precisão que se julgava necessário para a simulação da caldeira de uma planta de geração de energia elétrica, o conjunto de equações foi resolvido pelo método de volumes finitos, considerando os modelos das reações químicas e da transferência de calor por radiação. O modelo E-A (do inglês: *Eddy Break-Up – Arrhenius*) foi utilizado para calcular as taxas de reações químicas. Porém, para a combustão, o modelo utilizado considera a reação química em uma única etapa entre combustível e oxidante. Considerou-se o Método de Fluxo para solucionar a transferência de calor, o qual simplifica a equação de transferência radiativa para uma dimensão para, posteriormente, ser aplicada às três dimensões do problema. Para a comparação de resultados, foram utilizados dados experimentais de duas fornalhas, obtendo-se uma concordância significativa.

A queima de gás natural em uma câmara cilíndrica, considerando um queimador na linha de simetria, em coordenadas cilíndricas axissimétricas, foi estudada por Magel et al., 1996. O trabalho obteve resultados numéricos que foram comparados a dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994. Este trabalho apresenta as concentrações dos principais compostos químicos e de perfis de temperatura para algumas posições no interior da câmara.

Magel et al., 1995, apresentaram um estudo numérico utilizando o método dos volumes finitos para a predição do processo de combustão em caldeiras. Para simular a queima do carvão pulverizado, os autores utilizaram o modelo de combustão baseado no EDC (do inglês: *Eddy Dissipation Concept*) e resolveram equações de conservação de quantidade de movimento, de massa e de quantidades escalares (entalpia e frações mássicas das principais espécies químicas envolvidas), empregando o modelo $k-\varepsilon$ para simular a turbulência.

A combustão de gás natural também foi estudada por Magel et al., 1996 a., ao modelar a queima em uma câmara de combustão considerando coordenadas cilíndricas axissimétricas, com um único queimador situado na linha de simetria da câmara. Como resultado de suas investigações, os autores apresentaram perfis de temperatura, de concentrações de oxigênio,

de monóxido de carbono e de dióxido de carbono para várias posições de interesse no interior da câmara de combustão. Seus resultados foram comparados com dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994.

Dando sequência ao trabalho, Magel et al., 1996b, estudaram numericamente o processo de combustão turbulenta no interior de uma câmara cilíndrica com a mesma geometria e potência do queimador utilizados no trabalho anterior. Considerando o processo de combustão turbulenta sem pré-mistura, as reações químicas foram consideradas de forma detalhada e a radiação térmica foi considerada através do método de ordenadas discretas, assumindo coeficiente de absorção do meio pelo modelo de gás cinza (GC). Magel et al., 1996b, mostraram perfis de temperatura, de concentrações de oxigênio, de monóxido e de dióxido de carbono para várias posições no interior da câmara de combustão, além de resultados da taxa de formação de NO_x, obtidos com cálculos de pós-processamento. Os resultados daquele trabalho novamente foram comparados com os dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994, obtendo sensível concordância.

Três modelos de combustão foram investigados e comparados por Gran e Magnussen, 1996, o EDC, o β -PDF (do inglês: *Probability Density Function*), e o PDF-*transport*. Eles desenvolveram um estudo numérico sobre processos reativos com chama difusiva estabilizada, verificando a capacidade de solução de modelos de combustão baseados em taxas finitas de reações químicas e também com reações químicas instantâneas. Concluíram que quando se assumiram reações químicas instantâneas, o método PDF-*transport* fornecia melhores resultados para a temperatura e para as frações mássicas do que os modelos EDC e β -PDF. Quando taxas finitas de reações químicas foram assumidas, os resultados do modelo EDC concordaram melhor com os dados experimentais.

O software Ansys Fluent foi utilizado por Gomes et al., 1997, com a finalidade de simular os processos de combustão do gás natural em fornalhas cilíndricas. Foram incluídas na modelagem as equações de conservação de energia, de massa, de espécies químicas e de quantidade de movimento, os modelos de turbulência k - ϵ , de reações químicas E-A, e de transferência de calor por radiação DTRM (do inglês: *Discrete Transfer Radiation Model*), sendo ainda empregado o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG – do inglês: *weighted-sum-of-gray-gases*) para a determinação do coeficiente de absorção do meio participante. Os resultados obtidos neste trabalho também foram comparados aos resultados experimentais de Garréton e Simonin, 1994, apresentando sensível concordância.

Estudos numéricos sobre a formação de NO_x em processo de combustão de gás natural em câmaras cilíndricas foram realizados por Isnard e Gomes, 1998. O trabalho teve como objetivo principal investigar a performance de um modelo baseado na formação de Volumes Finitos. Foram resolvidas, além das equações de conservação da energia e das espécies químicas, as equações de Navier-Stokes e o modelo de turbulência $k-\varepsilon$. Também foi empregado o modelo generalizado de taxas finitas de reações químicas E-A para o cálculo das reações químicas e o modelo de transferência de calor por radiação DTRM, na previsão da formação de NO_x em processos industriais de combustão a gás natural. Os autores utilizaram também o mecanismo de Zeldovich para a determinação do processo de oxidação do nitrogênio. Os resultados deste trabalho apresentaram boa concordância com os resultados presentes na literatura.

Foi realizada por Nieckele et al., 2001, uma análise numérica utilizando o software Ansys Fluent, envolvendo processos de combustão em uma câmara cilíndrica, para a qual dados experimentais foram avaliados. A radiação térmica foi resolvida com o DTRM acoplado ao modelo WSGG e o mecanismo de reação de metano foi considerado em dois passos. O trabalho apresentou um estudo comparativo entre diferentes modelos de combustão, comparando os resultados obtidos com dados experimentais apresentados em Garréton e Simonin, 1994. Dentre os modelos de combustão utilizados estão o modelo E-A e o modelo β -PDF. Foi mostrado que o modelo de combustão que mais se aproximou dos dados experimentais foi o modelo E-A, obtendo sensível concordância com os resultados experimentais.

Fairweather e Woolley, 2004, apresentaram um estudo numérico de processos de combustão em chamas turbulentas de metano sem pré-mistura, no qual foi utilizado o modelo CMC (do inglês: *Conditional Moment Closure*) de primeira ordem, para modelagem da combustão. As soluções numéricas foram obtidas com o método de volumes finitos. Foram usados dois modelos de turbulência, o $k-\varepsilon$ padrão e o RSM (do inglês: *Reynolds Stress Model*). As reações químicas foram resolvidas com o uso de dois mecanismos de cinética química: o GRI-Mech 2.11, composto por duzentas e setenta e nove reações e quarenta e nove espécies, e o GRI-Mech 3.0, composto por trezentas e vinte e cinco reações e cinquenta e três espécies químicas. Diversas simulações foram realizadas variando parâmetros, tais como vazão e concentração de combustível. Os resultados foram comparados com dados experimentais, obtendo boa concordância para todas as situações, com exceção da predição

das frações molares de NO_x, que não apresentaram boa concordância para alguns casos. Com relação à comparação entre os modelos de turbulência utilizados, ambos os modelos apresentaram bons resultados, havendo pouca diferença entre eles.

Uma pesquisa numérica foi realizada por Yang e Blasiak, 2005, sobre a influência da temperatura de entrada do combustível durante o processo de combustão em um jato de propano pré-aquecido e ar, sem pré-mistura, em uma fornalha retangular. A modelagem foi baseada nas equações médias de Navier Stokes, juntamente com as equações médias de conservação de energia e de espécies químicas, empregando dois modelos de combustão, EBU (do inglês: *Eddy Break-Up*) e β -PDF, com o objetivo de comparar seus resultados. O modelo de turbulência adotado foi o k - ε RNG (do inglês: *Renormalization Group*). Os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais obtendo uma melhor concordância para o modelo EBU, principalmente com relação às magnitudes de temperaturas e formato da chama.

Ilbas, 2005, utilizou o software Ansys Fluent para simular numericamente uma câmara cilíndrica, avaliando o efeito da radiação térmica em chamas turbulentas de hidrogênio e/ou metano, utilizando dois métodos para solução da equação de transferência radiativa (do inglês: RTE – *Radiative Transfer Equation*), o P-1 e o DTRM, e considerando o coeficiente de absorção da mistura gasosa pelo modelo GC (do inglês: *Gray Gas*). Foi utilizado o modelo k - ε padrão para modelagem da turbulência, mecanismo de reação de três passos e taxas das reações calculadas pelo modelo E-A. Os resultados incluindo os cálculos de radiação térmica concordaram melhor com os dados experimentais do que os resultados das simulações que desprezaram a transferência de calor radiativa. Além disso, os resultados mostraram que os níveis de temperatura na câmara de combustão foram reduzidos quando a radiação térmica foi levada em consideração nos cálculos para ambos os métodos de solução da RTE, enquanto os resultados para tais métodos não apresentaram diferenças.

Lignell et al., 2007, estudaram a formação e o transporte de fuligem em uma chama turbulenta de etileno e ar sem pré-mistura, empregando em geometria bidimensional a simulação numérica direta (DNS – do inglês: *Direct Numerical Simulation*) com mecanismo de reação do etileno descrito em quinze passos e da fuligem em quatro passos, com altíssimo esforço computacional, sendo necessárias mais de trinta mil horas para simular cinco milissegundos do fenômeno físico. O domínio físico possuía seis centímetros quadrados e foi discretizado em novecentos e sessenta mil volumes. Apesar do alto custo computacional e ser

limitado a geometrias simples, este tipo de estudo é primordial para mostrar aspectos fenomenológicos da combustão.

A combustão de metano foi simulada numericamente para uma câmara cilíndrica por Silva et al., 2007. Foi empregado o método de volumes finitos para resolver as equações da conservação da energia, da quantidade de movimento, de massa e das principais espécies químicas envolvidas no processo de queima do gás. A radiação térmica foi resolvida pelo método das zonas, os efeitos da turbulência foram avaliados com o modelo $k-\varepsilon$ e o comportamento espectral do meio foi modelado com o WSGG. Os resultados indicaram que o maior efeito da radiação térmica foi percebido nos fluxos de calor nas paredes da câmara, onde se observou que as trocas de calor por radiação foram mais importantes que as por convecção. Uma homogeneização maior no campo de temperaturas dentro da câmara cilíndrica foi causada pelas trocas radiativas, reduzindo os picos de temperatura e aumentando as temperaturas mais baixas, sendo que a diferença nos resultados, considerando ou não as trocas de calor por radiação, ultrapassou 150 K em alguns casos. Porém, os efeitos da radiação térmica nas reações químicas não foram significativos.

A transferência de calor radiativa em uma caldeira industrial com geometria tridimensional foi simulada por Borjini et al., 2007, considerando a existência de fuligem, com misturas homogêneas e não-homogêneas de CO_2 e H_2O , assim como campos de temperatura isotérmicos e não-isotérmicos. A fuligem foi tratada pelo modelo GC e o coeficiente de absorção dos gases modelado pelo modelo WSGG. Os resultados apresentados mostraram que a consideração da fuligem aumentou significativamente a transferência de calor por radiação na caldeira.

Galarça et al., 2008, apresentou novas correlações para o modelo da soma ponderada de gases cinza e para os coeficientes de absorção visando o uso computacional eficiente do modelo. Essas correlações foram construídas a partir de valores tabelados de emissividade total obtidos pelo método de Monte Carlo aplicado à função distribuição da linha de absorção do corpo negro (ALBDF) descritos em Maurente et al., 2007, que considera em detalhes o comportamento esperado dos meios participantes. É esperado que essas correlações sejam mais precisas que as propostas por Smith et al., 1982.

Saji et al., 2008, consideraram o efeito da fuligem sobre a radiação térmica simulando numericamente e também através de forma experimental uma chama difusiva laminar de etileno e ar. Através de um mecanismo de reação de dezessete passos, no qual o coeficiente de absorção da mistura gasosa e fuligem foi considerado pelo modelo GC. Os autores resolveram

as equações de Navier-Stokes em coordenadas cilíndricas axissimétricas, juntamente com as equações de conservação de energia, de espécies gasosas e de fuligem, utilizando o método de volumes finitos. Os dados apresentaram boa concordância entre os resultados numéricos e os experimentais ao se comparar a altura da chama e a distribuição de temperatura.

Maurente et al., 2008, apresentaram o cálculo da transferência de calor radiativa em uma cavidade cilíndrica. Foram estudados e comparados os resultados provenientes da aplicação de dois modelos espectrais de gases: o modelo da função distribuição ALB (do inglês: *Absorption-Line Blackbody distribution function*) e o modelo WSGG padrão baseado em coeficientes e correlações. Os resultados mostraram a importância de considerar a não-homogeneidade do meio participante para um cálculo confiável da transferência de calor radiativa, característica que apenas o modelo WSGG atende.

A transferência de calor radiativa em uma chama turbulenta de propano e ar sem pré-mistura foi investigada por Paul e Paul, 2010, dentro de uma câmara de combustão cilíndrica tridimensional. Utilizaram a simulação de grandes escalas (LES – do inglês: *Large Eddy Simulation*) para solução das equações de transporte e o método de ordenadas discretas para solução da RTE, considerando o coeficiente de absorção da mistura de gases, fuligem como cinza e ignorando o efeito do espalhamento. Avaliando as ordens das quadraturas do método de ordenadas discretas, verificaram que as aproximações S_4 , S_6 e S_8 concordaram bem entre si, enquanto a aproximação S_2 forneceu resultados insatisfatórios, discordando das demais aproximações de ordens mais elevadas.

Saqr et al., 2010, aplicaram uma modelagem clássica da turbulência com médias de Reynolds (RANS - do inglês: *Reynolds Averaged Navier-Stokes equations*) em coordenadas cilíndricas axissimétricas empregando um mecanismo de reação de metano em um único passo, modelagem da turbulência através do modelo $k-\varepsilon$, e modelagem da combustão com o EDM (do inglês: *Eddy Dissipation Model*). Esta aplicação tem como objetivo analisar o efeito do aumento da intensidade de turbulência na corrente de ar sobre a formação de NO e de fuligem em uma câmara de combustão cilíndrica com chama turbulenta difusiva de metano. Os gradientes de temperatura encontrados nas simulações apresentaram concordância aceitável com medições experimentais, enquanto os resultados também mostraram que o aumento da intensidade de turbulência da corrente de ar resultou em uma redução significativa na formação de NO na chama, e em uma redução apreciável da formação de fuligem. Esta modelagem clássica foi amplamente empregada em trabalhos que envolvem a modelagem completa de processos de combustão. Muitos trabalhos descritos neste texto

utilizaram esta metodologia para tratar o fenômeno da turbulência juntamente com as equações de combustão. De maneira geral, trabalhos que utilizaram metodologias DNS ou LES, são trabalhos que empregaram a modelagem RANS.

Mossi et al., 2010a, utilizou um código de volumes finitos para simular uma chama laminar difusiva de metano e ar. Foram resolvidas as equações de conservação de energia, massa, quantidade de movimento e de espécies químicas, incluindo a formação de fuligem e cinética química detalhada. Para a radiação térmica, resolveu-se a RTE com o método de ordenadas discretas, modelando o coeficiente de absorção com o modelo GC e com o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza baseado em linhas espectrais (SLW – do inglês: *Spectral Line-based Weighted-sum-of-gray-gases*). O trabalho comparou os resultados para as distribuições de temperatura, concentração de espécies gasosas e fuligem obtidos com os dois modelos de coeficientes de absorção.

Krishnamoorthy, 2010, realizou cálculos da transferência de calor radiativa em poças de incêndio de tolueno e heptano, empregando o método de ordenadas discretas, assim como considerando os efeitos da autocorrelação da temperatura nas interações turbulência-radiação (TRI – do inglês: *Turbulence-Radiation Interactions*). Neste estudo, o autor utilizou dados experimentais de fração volumétrica de fuligem, temperatura (e sua variância) e concentrações de gases, com o objetivo de comparar diferentes modelagens espectrais dos gases, tais como modelo GC, modelo WSGG, modelo SLW e modelo EWBM (do inglês: *Exponential-Wide-Band Model*), incluindo ainda a contribuição da radiação da fuligem, considerando coeficiente de absorção independente da variável espectral.

Demarco et al., 2011, comparou as soluções de referência obtidas com o modelo SNB (do inglês: *Statistical Narrow Band*) com os principais modelos de propriedades radiativas, como: GC, SNBCK (do inglês: *Statistical Narrow Band Correlated-k*), WSGG, FSCK (do inglês: *Full-Spectrum Correlated-k*), e SLW, em meios contendo misturas de vapor de água, dióxido de carbono e fuligem. De acordo com os resultados do trabalho, mostrou-se que o modelo WSGG forneceu melhores resultados que o modelo GC, evidenciando discrepâncias apenas para altas concentrações de fuligem. Para soluções que necessitem de alto grau de precisão, o modelo SNBCK foi recomendado, contudo, exigiu elevado custo computacional. Já os modelos FSCK e SLW foram os que forneceram o melhor balanço entre precisão dos resultados e exigência computacional.

Diversos modelos espectrais de gases foram testados em Becher et al., 2012, tais como modelos de banda estreita e banda larga, modelo SLW, e alguns modelos WSGG existentes

na literatura, por comparação às soluções LBL obtidas com a base dados espectrais HITEMP 2010. As comparações foram feitas para situações de combustão em ar e em oxigênio puro, com temperaturas entre 800 °C e 1800 °C e espessuras ópticas de 0,001 m à 100 m, realizando também os cálculos de emitância total. Os autores concluíram que o modelo WSGG proposto por Johansson et al., 2011, é o mais versátil para ser aplicado de forma eficiente em simulações computacionais, sendo o modelo mais recomendado para uso em simulações CFD.

Pourhoseini et al., 2013, apresentou os efeitos da injeção de fuligem na queima de gás natural em relação ao perfil de temperatura, cor da chama, formação de NO_x, CO e CO₂. A injeção de fuligem foi realizada na entrada de um queimador cilíndrico de laboratório. Além do estudo experimental, foi desenvolvido um código em CFD (do inglês: *Computational Fluid Dynamics*) para simular os processos no interior da câmara de combustão. Os campos de temperatura e o estudo de formação de NO_x apresentaram boa concordância com os dados experimentais colhidos em laboratório. Os resultados mostraram que uma injeção de 0,012 de fuligem em fração mássica reduz o pico de temperatura da chama em 211 K, enquanto que as demais temperaturas não mudam significativamente. Também verificou-se que a cor da chama muda para um tom amarelado quando há a injeção de fuligem na combustão de gás natural.

Duas chamas piloto em escala laboratorial foram investigadas por Yadav et al., 2013. O método PDF foi aplicado para modelagem das interações entre turbulência e cinética química, o modelo WSGG para modelagem do comportamento não-cinza dos gases, cinética química de metano em ar com quarenta e um passos de reação e modelagem das interações TRI através de um método empírico que considera a autocorrelação da temperatura no aumento da emissão de radiação. A simulação foi realizada através do software Ansys Fluent, sendo os resultados comparados com dados experimentais.

Prieler et al., 2014, estudou uma fornalha em escala laboratorial com o objetivo de analisar diferentes modelos de combustão. A avaliação considerou os modelos *steady laminar flamelet*, EDM e EDC. A modelagem das propriedades espectrais dos gases foi considerada com o modelo WSGG, e a RTE foi resolvida com o método de ordenadas discretas.

Centeno, 2014, apresentou simulações numéricas de uma chama turbulenta de metano e ar não pré-misturados em uma câmara cilíndrica, com o objetivo de estudar a influência da radiação térmica em termos gerais. Os modelos WSGG e GC foram considerados e comparados, em relação aos efeitos radiativos dos gases e da fuligem, avaliando também a

influência das interações TRI sobre a transferência de calor radiativa. Utilizando campos convergidos de temperatura, frações molares de H₂O e de CO₂ e fração volumétrica de fuligem, o trabalho também realizou comparações com o modelo LBL, baseado no banco de dados do HITEMP 2010 [Rothman et al., 2010], sendo este modelo considerado como *benchmark* para a representação das propriedades radiativas do meio participante, com o objetivo de estimar o erro introduzido nas soluções das simulações ao se empregar os modelos WSGG e GC, apresentando bons resultados para a utilização do WSGG. O trabalho mostrou a importância da consideração da fuligem juntamente com a mistura gasosa sobre a radiação térmica na câmara de combustão. Como verificado, a fuligem aumentou o fluxo de calor radiativo sobre a parede radial. A contribuição dos gases e da fuligem para a transferência radiativa foi de 92% e 8%, respectivamente. Os resultados estão em concordância com o reportado na investigação de Mehta, 2008, e dos dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994. Resultados adicionais dessa pesquisa foram apresentados em Centeno et al., 2015, A cinética química empregada para a formação e oxidação da fuligem foi considerada satisfatória pelos autores na comparação com os resultados de literatura encontrados. O termo fonte de calor radiativo apresentou um aumento de 30% nas regiões onde a concentração de fuligem é maior, quando comparada à simulação sem fuligem. No entanto, o valor total do termo fonte apresentou um aumento médio de apenas 1,54%. O fluxo de calor nas paredes da câmara foi aumentado em 25% nas regiões próximas às maiores concentrações de fuligem. Os resultados indicaram que um aumento na quantidade de fuligem presente na chama poderia intensificar o calor transferido às paredes, melhorando a eficiência do processo de combustão. O modelo WSGG mostrou possuir uma boa precisão, com um erro máximo de 4,8% e um erro médio de 1,2%, exigindo, contudo, apenas 1/7000 do esforço computacional do modelo LBL.

Recentemente, Reddy et al., 2015, investigaram o comportamento da formação, nucleação e oxidação da fuligem em chamas de metano em ar a partir de duas abordagens distintas. A primeira considerando a taxa de formação de acetileno e a segunda com dupla e tripla formação de anéis aromáticos para a formação da fuligem. Dois mecanismos químicos, GRI-Mech 3.0 e POLIMI foram utilizados para representar o efeito da concentração das espécies químicas durante a combustão. Foi utilizado o método WSGG para a modelagem do coeficiente de absorção do meio. Os trabalhos de Consalvi et al., 2015, e Wang et al., 2015, que tratam sobre a formação e oxidação da fuligem, respectivamente, ajudaram a elucidar questões importantes sobre os fenômenos.

1.3 Objetivos e contribuição deste trabalho

Como principal objetivo do presente trabalho, tem-se o estudo numérico da influência na radiação térmica a partir da injeção de fuligem no interior de uma câmara de combustão com chamas turbulentas de metano e ar. A bibliografia apresenta trabalhos que consideram a fuligem naturalmente formada a partir da queima do combustível, porém, poucos são os trabalhos que consideram a injeção externa de fuligem. Na presente pesquisa, apenas um trabalho foi encontrado com essas características, sendo este, com foco nas medições experimentais de temperatura e cinética química, não apresentando resultados em relação à transferência radiante.

Tomando-se por base os resultados de modelamentos que consideram a existência da fuligem com resultados de trabalhos que desprezam sua presença, espera-se que o fluxo de calor radiante nas paredes aumente com a injeção de fuligem. Este resultado é considerado positivo em caldeiras, pois faz com que a eficiência da câmara de combustão aumente. Para outros equipamentos, como incineradores ou fornos, muitas vezes este resultado pode não ser desejado, quando se quer que a temperatura aumente e que não haja troca de calor com o meio exterior. Além desta verificação, este trabalho também avalia o comportamento do termo fonte de calor radiante e do campo de temperaturas.

1.4 Organização do trabalho

Após a introdução do trabalho, são explorados no Capítulo 2 os tópicos relacionados à simulação do processo de combustão e também do escoamento turbulento associado ao fenômeno no interior da câmara. O modelamento matemático é descrito em detalhes e são relacionadas as considerações feitas para a conservação de massa, de energia, de quantidade de movimento e de espécies químicas, assim como para a turbulência.

No Capítulo 3, encontra-se o detalhamento da modelagem matemática da radiação térmica. Inicia-se descrevendo o poder emissivo de um corpo negro, explora-se a radiação em meios transparentes e participantes. Há também uma síntese sobre o modelo da soma ponderada de gases cinza e sobre a radiação da fuligem. Ao final do capítulo são descritas as interações turbulência-radiação.

Na sequência, é realizada a apresentação do problema físico no Capítulo 4. Nele são

expostas as dimensões da câmara de combustão, assim como suas condições iniciais e de contorno. Também são apresentadas as propriedades termofísicas consideradas no trabalho.

Os métodos numéricos são expostos no Capítulo 5, iniciando com a apresentação do método de volumes finitos e das ordenadas discretas, dois importantes métodos utilizados na presente pesquisa, que embasam o algoritmo de solução. Neste capítulo, também é apresentada uma síntese dos critérios de independência de malha assim como a validação do modelamento, com base no balanço de energia.

Após, os resultados do trabalho são mostrados e discutidos no Capítulo 6, considerando o impacto da injeção de fuligem no interior da câmara na transferência de calor radiativa.

Ao final, há a conclusão do trabalho que realça os pontos importantes que foram investigados, seguidos das sugestões para trabalhos futuros relacionados à presente pesquisa.

2 MODELAGEM MATEMÁTICA DO PROCESSO DE COMBUSTÃO TURBULENTE DE GASES EM CÂMARAS CILÍNDRICAS

As simulações numéricas possuem uma grande gama de recursos e possibilidades de se explorar os resultados. Em alguns casos se torna possível simular condições que são inviáveis de se produzir experimentalmente, como alterar valores de apenas uma variável e verificar como os fenômenos se comportam.

Modelos matemáticos têm sido usados para simular numericamente processos físicos nas últimas décadas. Problemas que antes eram solucionados de forma simplificada estão sendo resolvidos em condições mais próximas às reais devido ao avanço na capacidade de processamento dos computadores.

A modelagem dos processos de combustão em câmaras é uma área de pesquisa em expansão. Eaton et al., 1999, resumem os modelos de combustão comumente utilizados e apresentam uma revisão do modelamento matemático para a conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas acoplado à modelos de turbulência, modelos de reações químicas e modelos de transferência de calor por radiação mais simplificados.

Neste capítulo, serão apresentadas as equações governantes para o processo de combustão turbulenta, considerando regime permanente, incompressível, em coordenadas cilíndricas axissimétricas. As equações estão agrupadas conforme a conservação de massa, de energia, de quantidade de movimento e de espécies químicas, aplicando o modelo $k - \varepsilon$ para determinar a viscosidade turbulenta, assumindo a hipótese de Boussinesq. O equacionamento da formação de fuligem também é apresentado neste capítulo, assim como dos modelos de combustão que serão utilizados. Estas equações são encontradas na bibliografia, como em: Launder e Spalding, 1972; Hinze, 1975; Schlichting, 1979; Eaton et al., 1999; Silva Freire et al., 2002; Wilcox, 2006; e Versteeg e Malalasekera, 2007.

2.1 Modelagem clássica da turbulência

O método de *Tensão de Reynolds*: RANS (do inglês: *Reynolds Averaged Navier-Stokes equations*), introduzido por Reynolds, 1895, baseia-se na ideia de se realizar uma média temporal sobre as equações de conservação que modelam os escoamentos. Este é o

ponto de partida para a maioria das simulações de escoamentos. De acordo com este conceito, qualquer quantidade do escoamento (velocidade, temperatura, pressão e concentrações de espécies) pode ser expressa através de uma quantidade média e outra flutuante associada à turbulência [Wilcox, 2006].

Este método é indicado em muitas situações quando é suficiente, ou por ser muitas vezes necessário, uma solução que resolva o escoamento médio. Os procedimentos empregados normalmente para determinar as médias temporais são: média de Reynolds, utilizada no presente trabalho e a média de Favre [Kuo, 2005], que considera a média ponderada pela massa.

O número de equações de conservação permanece o mesmo enquanto são necessários termos adicionais nas equações devido às parcelas flutuantes das propriedades instantâneas do escoamento. Estes termos são denominados *Tensões de Reynolds* e fazem com que surja o problema de fechamento. Para solucionar este problema, foi necessário introduzir novas equações para a modelagem dos termos adicionais nas equações de conservação da quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas. Surgiram, então, os modelos de turbulência.

Para um escoamento unidirecional ao longo de uma placa plana infinita, Boussinesq, 1877, propôs que a contribuição da turbulência na transferência de quantidade de movimento (tensão de Reynolds) poderia ser modelada por

$$-\overline{\rho u'v'} = \mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \quad (2.1)$$

onde y é a direção normal a superfície, \bar{u} é a componente da velocidade temporal média na direção paralela à superfície, u' e v' são as flutuações de velocidade associadas às componentes de velocidades instantâneas u e v , paralela e normal à superfície, respectivamente. Diferente da viscosidade molecular, a viscosidade turbulenta, μ_t , é uma propriedade do escoamento, sendo então uma medida local do nível de turbulência e não uma propriedade física do fluido, variando de ponto a ponto e conforme o escoamento estudado.

A modelagem clássica da turbulência é aplicada no presente trabalho. Esta metodologia apresenta ótima relação entre o custo computacional necessário e a concordância de resultados numéricos com dados experimentais, julgando-se então apropriada ao principal objetivo que constitui a análise da radiação térmica em uma chama turbulenta após a injeção

de fuligem.

Quando necessário, a aplicação da modelagem clássica da turbulência em conjunto com as equações de transferência de calor por radiação, pode-se utilizar um dos seguintes modelos de propriedades radiativas dos gases: soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG) ou gás cinza (GC). O presente trabalho aplica as propriedades radiativas conforme o modelo WSGG, indicado por Centeno, 2014, como sendo o que mais se aproxima dos dados experimentais para os casos em que se considera a formação da fuligem.

O presente trabalho também emprega a aproximação para baixos números de Mach. Esta formulação permite que a massa específica possa variar de acordo com as variações de temperatura, porém permanecendo incompressível. A formulação é considerada adequada para processos de combustão subsônicos [Poinsot e Veynante, 2005].

Além da modelagem clássica da turbulência, há outras duas metodologias comumente utilizadas para a solução numérica dos escoamentos turbulentos, são: a simulação numérica direta (DNS) e a simulação de grandes escalas (LES) [Lesieur et al., 2005; Wilcox, 2006; Saugat, 2006].

A simulação numérica direta (DNS) tem como principal característica a resolução das equações de conservação em todas as escalas do escoamento. Além da discretização espacial bastante refinada, deve-se ainda levar em conta outros aspectos importantes na DNS: necessidade de utilizar pequenos incrementos de tempo devido ao comportamento dos vórtices de pequenas escalas, necessidade de utilizar um tempo de integração numérica muito maior do que a escala de tempo das maiores escalas para se obter boa convergência das estatísticas da turbulência e ainda, há a necessidade de se utilizar esquemas numéricos com boa precisão, tanto para a discretização espacial quanto para a discretização temporal [Lesieur et al., 2005]. A alta exigência computacional para a utilização desta metodologia a torna praticamente proibitiva [Coelho, 2012], o que faz com que fique restrita a meios opticamente finos devido às restrições de tamanho de malha.

Outra abordagem possível é utilizar a metodologia da simulação de grandes escalas (LES). Nela, as variáveis (temperatura, pressão, velocidade, etc.) são decompostas em uma parte dita de grandes escalas e uma parte dita sub-malha, por meio de uma operação de filtragem espacial passa-baixa [Lesieur et al., 2005; Saugat, 2006; Pope, 2008]. As estruturas turbulentas transportadoras de energia e quantidade de movimento (grandes escalas) são resolvidas diretamente da solução das equações filtradas, enquanto que apenas as menores estruturas (escalas sub-malha) são modeladas [Silva Freire et al., 2002]. Sua utilização vem se

tornando mais usual, apesar das exigências computacionais serem muito maiores em LES do que na modelagem clássica (RANS), espera-se que a precisão também seja muito melhor, uma vez que as grandes escalas do escoamento são calculadas explicitamente, e somente os efeitos das escalas sub-malha precisam ser modelados [Coelho, 2012].

2.2 Conservação de massa

Para escoamentos turbulentos, a equação da conservação de massa em coordenadas cilíndricas axissimétricas, considerando regime permanente, incompressível, pode ser descrita, já aplicando-se as Médias de Reynolds – RANS, como

$$\frac{\partial}{\partial z}(\bar{\rho}\bar{u}) + \frac{\partial}{\partial r}(\bar{\rho}\bar{v}) + \frac{\bar{\rho}\bar{v}}{r} = 0 \quad (2.2)$$

onde \bar{u} e \bar{v} são as componentes da velocidade média nas direções axial e radial z e r , respectivamente, e $\bar{\rho}$ é a massa específica temporal média da mistura.

2.3 Conservação de energia

A equação da conservação de energia em termos de entalpia, em coordenadas cilíndricas axissimétricas, considerando regime permanente e incompressível para escoamentos reativos em regime turbulento tem a forma

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z}(\bar{\rho}\bar{h}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r}(\bar{\rho}\bar{h}) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\frac{k}{c_p} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \bar{h}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\frac{k}{c_p} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \bar{h}}{\partial r} \right) + \overline{S_{rad}} \quad (2.3)$$

onde o somatório das entalpias médias temporais de cada espécie define a entalpia total temporal média da mistura \bar{h} , conforme

$$\bar{h} = \sum_{\alpha} \bar{y}_{\alpha} \bar{h}_{\alpha} \quad (2.4)$$

A entalpia de cada espécie α é dada por

$$\overline{h}_\alpha = h_\alpha^0 + \int_{T_{ref}}^{\bar{T}} c_{p,\alpha} dT \quad (2.5)$$

onde T_{ref} é a temperatura de referência, $c_{p,\alpha}$ é o calor específico a pressão constante da espécie α e h_α^0 é a entalpia de formação da mesma espécie α .

O termo c_p representa o calor específico a pressão constante da mistura, conforme

$$c_p = \sum_{\alpha} \bar{y}_\alpha c_{p,\alpha} \quad (2.6)$$

Na Eq. (2.3), \overline{S}_{rad} é o termo fonte radiativo, que será estudado em detalhes nos próximos capítulos, pois tem fundamental importância no presente trabalho. Pode ser calculado como

$$\overline{S}_{rad} = -\nabla \cdot \vec{q}_{rad} \quad (2.7)$$

A equação (2.3), referente ao cálculo da conservação de energia, pode ser escrita em termos da temperatura, ao invés da entalpia. Neste caso, apareceria também um termo fonte devido às reações químicas \overline{S}_{rea} , que deve ser somado ao termo fonte de calor radiativo \overline{S}_{rad} , este termo fonte referente às reações químicas, pode ser calculado de acordo com a expressão abaixo

$$\overline{S}_{rea} = \sum_{\alpha} \left[h_\alpha^0 + \int_{T_{ref}}^T c_{p,\alpha} dT \right] \overline{R}_\alpha \quad (2.8)$$

onde \overline{R}_α representa o consumo ou formação da espécie α em taxa volumétrica, obtida de acordo com o modelo de combustão. Todas as espécies químicas (produtos e reagentes) que fazem parte das reações de combustão devem ser consideradas.

Atendendo à consideração feita para processos turbulentos subsônicos, a aproximação para baixos números de Mach permite que a massa específica média da mistura seja calculada

através da equação de estado de gás perfeito [Spalding, 1979; Fluent, 2009]

$$\bar{\rho} = \frac{p_0 \overline{MM}}{RT} \quad (2.9)$$

onde p_0 é a pressão de operação da câmara (pressão atmosférica) e \overline{MM} é a massa molecular que varia de acordo com a concentração da mistura, a qual se calcula por

$$\overline{MM} = \left(\sum_{\alpha} \frac{y_{\alpha}}{MM_{\alpha}} \right)^{-1} \quad (2.10)$$

onde \overline{MM}_{α} representa a massa molecular da espécie α .

2.4 Conservação de quantidade de movimento

Conforme a introdução do capítulo, as equações da conservação de quantidade de movimento em coordenadas cilíndricas serão axissimétricas para o presente estudo, em regime permanente e incompressível e são descritas também já com as médias de Reynolds nas direções axial e radial, respectivamente, por

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{u}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \bar{u}) = & -\frac{\partial p^*}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r (\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{v}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \bar{v}) = & -\frac{\partial p^*}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r (\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) - \frac{(\mu + \mu_t) \bar{v}}{r^2} + \frac{\bar{\rho} \bar{w}^2}{r} \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde μ_t é a viscosidade turbulenta, μ é a viscosidade dinâmica da mistura gasosa, C_{μ} é uma constante empírica do modelo de turbulência, \bar{p} é a pressão temporal média da mistura gasosa, o termo $p^* = \bar{p} - (2/3)k$ é a pressão modificada, onde a parcela $(2/3)k$ representa a

forma generalizada do tensor de Reynolds [Kolmogorov, 1942]. A equação que representa movimentos angulares não é resolvida no presente trabalho, uma vez que se considera que não há presença de *swirl*. Ou seja, o escoamento de ar e combustível é considerado na direção axial na entrada da câmara.

2.5 Modelagem matemática da turbulência

Há diversos modelos para se obter a viscosidade turbulenta: algébricos, de uma ou duas equações e também modelos de fechamento de segunda ordem, também conhecidos como modelos de transporte de tensões [Prandtl, 1925; Kolmogorov, 1942; Prandtl, 1945; Chou, 1945; Rotta, 1951; Wilcox, 2006].

O modelo de turbulência $k - \varepsilon$, proposto inicialmente por Launder e Spalding, 1972, é um dos mais difundidos atualmente. Ele utiliza duas equações de conservação para determinar a viscosidade turbulenta, a exemplo do que acontece com o modelo $k - \omega$. Apesar de suas limitações, tais como em aplicações em escoamentos parietais, regiões com recirculação ou separação de camadas limites [Silva Freire et al., 2002; Fluent, 2009], o modelo $k - \varepsilon$ tem sido empregado em simulações de combustão em câmaras de combustão cilíndricas, provendo bons resultados [Gomes et al., 1997; Silva et al., 2007] e por este motivo foi escolhido para ser utilizado no presente trabalho.

São consideradas duas equações para compor o modelo, uma de conservação para a energia cinética turbulenta k e outra para a sua dissipação ε . Em coordenadas cilíndricas axissimétricas, considerando regime permanente, tem-se

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} k) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} k) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial r} \right) + P_k - \bar{\rho} \varepsilon \quad (2.13)$$

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \varepsilon) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right) + C_{1,\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{2,\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.14)$$

onde P_k é o termo de produção ou dissipação de energia cinética turbulenta, que pode ser definido, em coordenadas axissimétricas por

$$P_k = \mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \quad (2.15)$$

Define-se a viscosidade turbulenta como

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.16)$$

Da bibliografia [Launder e Spalding, 1972; Launder e Sharma, 1974; Cotton e Jackson, 1990; Davidson, 1990; Xia et al., 1998] são extraídas as constantes para o modelo

$$C_{1,\varepsilon} = 1,44 \quad C_{2,\varepsilon} = 1,92 \quad C_\mu = 0,09 \quad \sigma_k = 1,0 \quad \sigma_\varepsilon = 1,3$$

Na região próxima às paredes sólidas, há formação de vórtices que possuem diminutas escalas de comprimento e, por consequência, altas frequências. Por esta razão, a turbulência destas regiões pode ser considerada estatisticamente independente dos vórtices de baixa frequência e do escoamento médio. Desta forma, pode-se assumir que o escoamento junto à parede é afetado somente pela proximidade da parede e pela característica do fluido em relação à viscosidade.

De acordo com Silva Freire et al., 2002, a região de parede pode ser dividida em três sub-regiões: (i) região turbulenta, (ii) camada de amortecimento e (iii) subcamada limite viscosa. São necessárias funções de parede para compor a modelagem matemática do problema.

Patankar, 1980, considera um perfil linear de velocidades na região próxima da parede e um perfil logarítmico é aplicado na região de escoamento turbulento. Para a dimensão característica adimensional tem-se

$$y^+ = y \left(\rho C_\mu^{1/4} k^{1/2} \mu^{-1} \right) \quad (2.17)$$

que indica qual o perfil de velocidade é aplicado, conforme

$$\begin{aligned}
y^+ \leq 11,5 &\rightarrow u^+ = y^+ \\
y^+ > 11,5 &\rightarrow u^+ = \frac{1}{\Lambda} \ln(y^+) + \Psi
\end{aligned}
\tag{2.18}$$

onde $u^+ = \bar{u}/u^*$ é a velocidade característica adimensional, $u^* = \sqrt{\tau_w/\rho}$ é a velocidade de fricção, em que τ_w é a tensão cisalhante na parede, e y é a distância a partir da parede. Para as constantes de proporcionalidade Λ e de ajuste Ψ , são aplicados valores que se ajustam aos dados experimentais reportados por Nikuradse, 1933.

De acordo com Patankar, 1980, o cálculo do fluxo de calor por difusão nas regiões próximas à parede também implica na utilização de funções de parede quando o escoamento é do tipo não-isotérmico. Com base em dados experimentais, para $y^+ > 11,5$ os efeitos da turbulência estão presentes e a difusão de calor tem sua intensidade aumentada, fazendo que seja necessária a aplicação da seguinte função de parede

$$\Gamma_T = \frac{\mu y^+}{Pr_t \left\{ 2,5 \ln(9y^+) + \left[9 \left(\frac{Pr}{Pr_t} - 1 \right) \left(\frac{Pr}{Pr_t} \right)^{-1/4} \right] \right\}}
\tag{2.19}$$

onde Γ_T é o coeficiente de difusividade térmica utilizado na equação da conservação de energia, Pr é o número de Prandtl ($Pr = c_p \mu / k$) e Pr_t é o número de Prandtl turbulento.

Para $y^+ \leq 11,5$ a transferência de calor para a parede é governada por fenômenos moleculares, sendo função apenas das propriedades do fluido em consideração. Sendo o coeficiente de difusividade térmica calculado por

$$\Gamma_T = \left(\frac{\mu}{Pr} \right)
\tag{2.20}$$

2.6 Conservação de espécies químicas

Durante as reações químicas, com a exceção do nitrogênio, que mantém-se inerte, a

equação da conservação da massa é resolvida para todas as espécies químicas. Em coordenadas cilíndricas axissimétricas, considerando regime permanente, a equação é definida, em médias de Reynolds, por

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{y}_\alpha) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \bar{y}_\alpha) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{y}_\alpha}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{y}_\alpha}{\partial r} \right) + \bar{R}_\alpha \quad (2.21)$$

onde Sc é o número de Schmidt ($Sc = \nu/D$), Sc_t é o número de Schmidt turbulento, \bar{y}_α é a fração mássica temporal média da espécie α e \bar{R}_α é a taxa volumétrica de formação ou consumo da espécie α , que é calculada como o somatório de todas as taxas volumétricas de formação ou consumo em todas as reações k onde a espécie α está presente. Esta taxa de formação ou consumo, $\bar{R}_{\alpha,k}$, pode ser obtida por uma expressão de cinética química de Arrhenius (*Modelo de Arrhenius*), por expressões que consideram que as taxas de reações químicas sejam controladas pela mistura turbulenta, tais como as equações de Magnussen (*Modelo Eddy Break-Up* [Magnussen e Hjertager, 1977]), ou ainda, de forma conjunta, pelas duas expressões (*Modelo Eddy Break-Up - Arrhenius* [Eaton et al., 1999; Nieckele et al., 2001; Silva et al., 2007; Fluent, 2009]).

No modelo de Arrhenius, a partir de conceitos de taxas finitas de reações químicas elementares, como reações bimoleculares e teorias de colisão, pode-se obter a taxa de formação ou de consumo de cada espécie α , para cada reação k onde ela se apresenta, $\bar{R}_{\alpha,k}$ [Turns, 2000; Law, 2006]. A equação de Arrhenius para a taxa $\bar{R}_{\alpha,k}$ é definida por

$$\bar{R}_{\alpha,k} = -\eta_{\alpha,k} \overline{MM}_\alpha \bar{T}^{\beta_k} A_k e^{(-E_k/\bar{R}\bar{T})} \prod_{\alpha, \text{reagentes}} \bar{c}_\alpha^{\gamma_{\alpha,k}} \quad (2.22)$$

onde \overline{MM}_α é a massa molecular da espécie α , β_k é o expoente da temperatura para cada reação k , A_k é o fator pré-exponencial da reação k , E_k é a energia de ativação da reação k , \bar{R} é a constante universal dos gases perfeitos ($8,3145 \text{ kJ} \cdot \text{kmol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$), \bar{c}_α é a concentração molar da espécie reagente α , $\gamma_{\alpha,k}$ é o expoente da concentração da espécie α na reação k e $\eta_{\alpha,k}$ é o coeficiente estequiométrico da espécie α na reação k (valores positivos para reagentes e

negativos para produtos).

No modelo *Eddy Break-Up* as taxas de reações químicas entre as espécies estão basicamente fundamentadas em teorias de dissipação de vórtices onde a turbulência está presente [Spalding, 1971, 1977; Magnussen e Hjertager, 1977]. Para aplicação do modelo, assume-se que a taxa de dissipação dos vórtices turbulentos seja proporcional à razão entre a dissipação da energia cinética turbulenta e a energia cinética turbulenta, ε/k . A taxa de reação $\overline{R_{\alpha,k}}$ pode ser expressa pelas equações

$$\overline{R_{\alpha,k}} = -\eta_{\alpha,k} \overline{MM}_{\alpha} K_1 \rho \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{\overline{y_{\alpha^*}}}{\eta_{\alpha^*,k} \overline{MM}_{\alpha^*}} \right) \quad (2.23)$$

$$\overline{R_{\alpha,k}} = \eta_{\alpha,k} \overline{MM}_{\alpha} K_1 K_2 \rho \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{\sum_p \overline{y_p}}{\sum_p \eta_{p,k} \overline{MM}_p} \right) \quad (2.24)$$

onde p representa as espécies químicas formadas como produtos da combustão, $\eta_{p,k}$ é o coeficiente estequiométrico da espécie química p do produto da reação k , \overline{MM}_p é a massa molecular dos produtos e $\overline{y_p}$ é a fração mássica dos produtos, o índice α^* representa a espécie reagente α que fornece o menor valor para $\overline{R_{\alpha,k}}$, K_1 e K_2 são constantes empíricas prescritas como 4,0 e 0,5 e ε/k é a escala de tempo para a turbulência obtida do modelo $k - \varepsilon$. Estas duas equações são resolvidas e assume-se o menor valor encontrado para $\overline{R_{\alpha,k}}$, e são aplicáveis para chamas difusivas e também pré-misturadas.

No modelo combinado E-A (*Eddy Break-Up* – Arrhenius), o menor valor obtido entre as três equações (Eq. (2.22), (2.23) e (2.24)) deve ser assumido como sendo o valor final da taxa de formação ou consumo das espécies químicas, que deve ser empregado no cálculo do termo fonte das equações de conservação de energia e de espécies químicas. Este modelo fornece bons resultados quando comparados com dados experimentais, sendo aplicados em [Nieckele et al., 2001; Miroslav et al., 2001; Ilbas, 2005; Silva et al., 2007; Bidi et al., 2008].

Para concluir o cálculo da taxa volumétrica de formação ou consumo da espécie α , faz-se o somatório de todas as taxas volumétricas de formação ou consumo em todas as

reações k onde a espécie α está presente

$$\overline{R_\alpha} = \sum_k \overline{R_{\alpha,k}} \quad (2.25)$$

2.6.1 Modelo de formação e oxidação de fuligem

As taxas de formação e oxidação da fuligem são calculadas no presente trabalho considerando o modelo de Magnussen e Hjertager, 1977, que para cálculo do campo de fuligem emprega de forma conjunta o modelo de Khan e Greeves, 1974. O campo de fuligem é um dos principais objetos de estudo deste trabalho, ele está relacionado com as análises que serão realizadas sobre a contribuição da fuligem para a transferência de calor radiativa no interior da câmara de combustão.

Há na literatura outros modelos para o equacionamento do campo de fuligem [Tesner et al., 1971; Köylü e Faeth, 1991; Brookes e Moss, 1999a], porém, seja por restrições de dimensões da câmara, espécies químicas ou tipo de chama, não são possíveis de serem aplicados na presente pesquisa.

A modelagem matemática da formação e da oxidação de fuligem ainda é um campo de pesquisa em desenvolvimento e é considerado um dos fenômenos mais complexos dentro da combustão.

A fuligem é formada por partículas de carbono e o fenômeno de formação destas partículas é observado na combustão de hidrocarbonetos e envolve processos físicos e químicos fortemente acoplados. Fundamentalmente, o processo de formação das partículas de fuligem pode ser dividido em três subprocessos: (i) nucleação, (ii) coagulação e aglomeração e (iii) reações superficiais nas partículas (incluindo crescimento e oxidação) [Haynes e Wagner, 1981; Law, 2006].

Os coeficientes sugeridos por Khan e Greeves, 1974, têm sido utilizados, sem alterações, por diversos autores [Coelho e Carvalho, 1995; Snegirev, 2004; Saario et al., 2005]. O modelo de formação de Khan e Greeves, 1974, tem a característica de poder ser acoplado ao modelo de oxidação de Magnussen e Hjertager, 1977. Esta combinação também pode ser aplicada para o cálculo das taxas de reação dos gases e compõem a modelagem padrão de fuligem do software Fluent, difundida ferramenta comercial para simulações térmicas [Fluent, 2009].

Comparações entre modelos de formação e oxidação de fuligem foram realizadas por Coelho e Carvalho, 1995, considerando chamas difusivas turbulentas de propano-ar, e concluíram que o modelo de formação de Khan e Greeves, 1974, utilizado no presente trabalho, fornece bons resultados, apesar da sua relativa simplicidade.

Considerando regime permanente em coordenadas cilíndricas axissimétricas, a seguinte equação de transporte para a fração mássica de fuligem é resolvida para se obter o campo de fuligem

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{y}_s) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \bar{y}_s) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{y}_s}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{y}_s}{\partial r} \right) + \bar{R}_s \quad (2.26)$$

onde \bar{y}_s representa a fração mássica temporal média de fuligem, e \bar{R}_s [$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$] representa a taxa volumétrica líquida de formação/oxidação de fuligem, a qual é determinada pela diferença entre as taxas de formação de fuligem e de oxidação de fuligem ($\overline{R_{s,form}}$ e $\overline{R_{s,oxid}}$, respectivamente).

$$\bar{R}_s = \overline{R_{s,form}} - \overline{R_{s,oxid}} \quad (2.27)$$

onde $\overline{R_{s,form}}$ é dado por

$$\overline{R_{s,form}} = C_s p_{comb} \phi^r e^{-E/RT} \quad (2.28)$$

sendo C_s (com valor de $1,5 \text{ kg} \cdot \text{N}^{-1} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$), a constante de formação de fuligem, p_{comb} é a pressão parcial do combustível [Pa], ϕ é a razão de equivalência, r é o expoente da razão de equivalência ($r = 3$), e E/R é a temperatura de ativação ($E/R = 20000 \text{ K}$).

O modelo de Magnussen é utilizado para o cálculo da taxa de oxidação da fuligem [Magnussen e Hjertager, 1977]. A taxa efetiva é limitada pela concentração de fuligem ou pela concentração de oxigênio, de acordo com o equacionamento que segue

$$\bar{R}_1 = K_1 \bar{\rho} \bar{y}_s \frac{\varepsilon}{k} \quad (2.29)$$

$$\overline{R_2} = K_1 \overline{\rho} \left(\frac{\overline{y_{ox}}}{\overline{\eta_s}} \right) \left(\frac{\overline{y_s \eta_s}}{\overline{y_s \eta_s + y_{comb} \eta_{comb}}} \right) \frac{\varepsilon}{k} \quad (2.30)$$

onde a taxa de oxidação efetiva é o menor valor entre duas expressões

$$\overline{R_{s,oxid}} = \min[\overline{R_1}, \overline{R_2}] \quad (2.31)$$

nas Eq.(2.29) e Eq.(2.30), $\overline{y_{ox}}$ e $\overline{y_{comb}}$ são as frações mássicas temporais médias de oxidante e de combustível, $\overline{\eta_s}$ e $\overline{\eta_{comb}}$ são coeficientes do modelo, retiradas de [Fluent, 2009].

2.6.2 Injeção externa de fuligem

Para simular a injeção externa de fuligem, uma das condições de contorno do problema é alterada. Considera-se que a fração mássica de fuligem $\overline{y_s}$ seja diferente de zero, igual à fração mássica de fuligem que se deseja avaliar na solução do problema. A injeção é realizada em conjunto com o ar da queima, simulando uma condição real de transporte da fuligem para o interior da câmara.

Esta consideração faz com que o mecanismo de oxidação de fuligem, descrito na seção 2.6.1 comece a consumir as partículas de carbono a partir do bocal de injeção, uma vez que ambas as fórmulas para oxidação, Eq. (2.29) e Eq. (2.30), não consideram a temperatura em suas fórmulas.

O modelo de Magnussen [Magnussen e Hjertager, 1977], utilizado por diversos autores já citados, foi construído com base na condição de consumir apenas a fuligem produzida pela própria chama. Nesta formação natural de fuligem, a temperatura é levada em consideração, conforme evidenciado na Eq. (2.28), já condicionando a formação à região de alta temperatura. Por consequência, o processo de consumo desta fuligem, dado pela oxidação, acontece também nesta região mais quente da câmara.

Em Reddy et al., 2015, é possível verificar que a taxa de oxidação de fuligem está concentrada nas regiões com temperaturas elevadas da câmara, acima de 1000 K. Com a finalidade de formar campos com fração volumétrica de fuligem mais próximos ao que se

espera em câmaras reais, foram realizados ajustes na formulação de oxidação de fuligem do presente trabalho, fazendo com que a oxidação aconteça nas regiões da câmara com maiores temperaturas. Para o fenômeno da oxidação da fuligem nas regiões mais frias, é aplicado um fator multiplicador (FM) na Eq. (2.31) que faz com que a modelagem da oxidação da fuligem seja aplicada de forma parcial nas regiões com temperatura abaixo de 1000 K, voltando a ser total na região mais quente da câmara.

De maneira alternativa, pode-se verificar que na região onde não se espera encontrar uma alta taxa de oxidação de fuligem, tem-se um número de Damköler (Da) menor do que um [Silva, 2005]. Isso demonstra que as reações químicas na região são governadas pela cinética química de Arrhenius, onde ocorre a mistura dos gases e o início da queima do combustível, pré-aquecendo os gases, resultando num aumento gradual da temperatura. Numa segunda abordagem, considerando a oxidação da fuligem, a taxa de oxidação é igualada a zero para $Da < 1$.

O número de Damköler é obtido da razão entre as taxas de reações químicas calculadas com os modelos de Arrhenius e Magnussen, sua distribuição é definida por

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_{ch}} \quad (2.32)$$

onde, τ_t é o tempo característico da turbulência e τ_{ch} é o tempo característico das reações químicas

3 MODELAGEM NUMÉRICA DA RADIAÇÃO TÉRMICA

O início dos estudos sobre a transferência de calor por radiação térmica provém da necessidade de se entender como o calor do sol é transferido até a terra. Saber quais são os principais parâmetros que interferem na transferência, assim como a quantidade de energia que é absorvida e espalhada na atmosfera terrestre, são desejos antigos dos cientistas e engenheiros, que desenvolvem estudos na área há muitos anos.

Em caráter de curiosidade, o estudo da radiação térmica também representa um marco na história da física, pois foi na tentativa de descrever o fenômeno em forma teórica, que Max Planck introduziu sua conhecida constante que tornou-se o marco de início de uma nova física, a física quântica.

De forma geral, o mecanismo de radiação térmica é compreendido como o transporte de energia térmica através de ondas eletromagnéticas emitidas por um meio, seja ele sólido, líquido ou gasoso. Tanto a temperatura, quanto a radiação térmica emitida, refletem o grau de energia interna do meio. De extrema importância na engenharia, o estudo da análise radiante serve de base para o dimensionamento de sistemas térmicos como câmaras de combustão, geradores de vapor e todos os tipos de fornos, sejam eles com aquecimento a partir de resistências elétricas ou queima de combustíveis.

São caracterizados como meios participantes as regiões onde gases e/ou partículas sólidas absorvem, emitem e espalham radiação. Estudos sobre os meios participantes têm recebido grande atenção nos últimos anos, uma vez que os processos que envolvem grandes trocas de calor por radiação são, muitas vezes, desenvolvidos em ambientes onde ocorrem processos de combustão de hidrocarbonetos (fornalhas, câmaras de combustão, explosões nucleares, fabricação de vidro, queima em meios porosos, entre outros) [Siegel e Howell, 2002]. Dentre os produtos da combustão há componentes que tornam a região um meio participante, como: (i) vapor d'água; (ii) dióxido de carbono, ambos gases; (iii) fuligem; e, se o combustível em questão for o carvão pulverizado, o (iv) material particulado em suspensão também deve ser considerado. O ar e os gases monoatômicos são considerados transparentes à radiação térmica.

A modelagem matemática contida neste capítulo pode ser encontrada com detalhes em Siegel e Howell, 2002, Modest, 2003 e Coelho, 2007.

3.1 Poder emissivo e intensidade de radiação do corpo negro

O corpo negro é um modelo que serve de padrão para definir propriedades radiativas de superfícies reais. Considera-se que ele seja um absorvedor e um emissor perfeito, ou seja, o corpo negro absorve a energia radiativa incidente em sua totalidade, independente da direção e do comprimento de onda. Não há superfície que emita mais energia do que um corpo negro, para certa temperatura e número de onda e a radiação emitida por um corpo negro independe da direção, sendo caracterizado como um emissor difuso. De acordo com as temperaturas e número de onda, a intensidade de radiação espectral do corpo negro é descrita pela distribuição espectral de Planck

$$I_{\eta,CN}(\eta,T) = \frac{2hc_0^2\eta^3}{e^{\left(\frac{hc_0\eta}{kT}\right)} - 1} \quad (3.1)$$

onde h é a constante universal de Planck ($h = 6,6256 \times 10^{-34}$ J·s), k é a constante universal de Boltzmann ($k = 1,3805 \times 10^{-23}$ J·K⁻¹), c_0 é a velocidade da luz no vácuo ($c_0 = 2,9979 \times 10^8$ m·s⁻¹), T é a temperatura e η é o número de onda. O poder emissivo espectral é dado por

$$E_{\eta,CN}(\eta,T) = \pi I_{\eta,CN}(\eta,T) \quad (3.2)$$

considerando que o corpo negro seja um emissor difuso, onde $E_{\eta,CN}(\eta,T)$ representa o poder emissivo espectral do corpo negro, com a unidade de W·m⁻²·cm, e $I_{\eta,CN}(\eta,T)$ representa a intensidade espectral do corpo negro, com a unidade de W·m⁻²·cm·sr⁻¹.

Com a finalidade de se calcular o poder emissivo total do corpo negro, é realizada a integração da Eq. (3.2) em todos os números de onda, resultando na relação conhecida como lei de Stefan-Boltzmann

$$E_{CN}(T) = \sigma T^4 \quad (3.3)$$

onde $E_{CN}(T)$ é o poder emissivo total do corpo negro, com a unidade de W·m⁻², que representa o fluxo de energia radiativa emitido por uma superfície de área unitária à

temperatura T e $\sigma = 5,6704 \times 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$ é a constante de Stefan-Boltzmann.

A partir da Eq. (3.3), pode-se obter a intensidade de radiação total associada à emissão do corpo negro, dada por

$$I_{CN}(T) = \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (3.4)$$

3.2 Intensidade de radiação de superfícies reais em meios transparentes

De acordo com a definição de Siegel e Howell, 2002, a intensidade de radiação de um corpo negro não varia com a direção. Pode-se utilizar esta definição para comparar a intensidade de radiação direcional emitida por superfícies reais. Por definição, a intensidade de radiação numa dada direção é definida como a energia que sai da superfície por unidade de tempo, por unidade de área projetada normal à direção original, e por unidade de ângulo sólido centrado em torno desta direção.

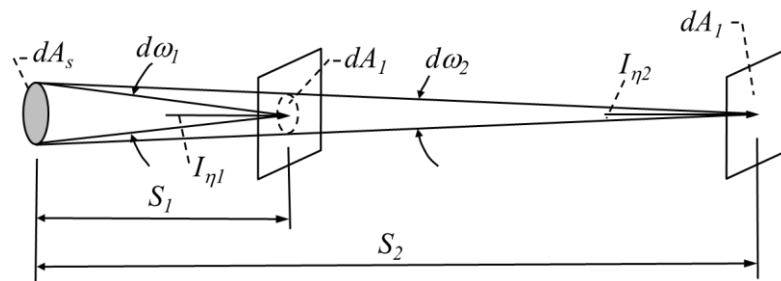


Figura 3.1 - Intensidade de radiação incidente em uma área dA_1 , a partir de uma fonte em dA_s [Siegel e Howell, 2002].

De acordo com a Fig. 3.1, supõe-se que radiação que sai de uma fonte dA_s , e então percorre um meio que não absorve, não emite, não espalha, e que possui propriedades radiativas constantes, ou seja, um meio ideal (também conhecido como meio transparente ou não-participante). Considera-se então que um elemento de área dA_1 está posicionado a uma distância S_1 de dA_s e que dA_s e dA_1 são normais à S_1 . Partindo da definição de intensidade espectral $I_{\eta,1}$ como a taxa de energia que passa através de dA_1 , por unidade de área projetada de dA_1 , por unidade de ângulo sólido, e por unidade de intervalo de número de onda, a energia

de dA_s passando através de dA_l na direção de S_l pode ser calculada como

$$I_{\eta,1}dA_1d\omega_1d\eta = I_{\eta,1}dA_1\left(dA_s/S_1^2\right)d\eta \quad (3.5)$$

onde $d\omega_1 = dA_s/S_1^2$ representa a relação de ângulo sólido.

Ao se aumentar a distância entre a fonte original e o elemento de área dA_l para uma nova distância S_2 , a taxa de energia que passa por dA_l na nova posição é dada por

$$I_{\eta,2}dA_1d\omega_2d\eta = I_{\eta,2}dA_1\left(dA_s/S_2^2\right)d\eta \quad (3.6)$$

A partir das Equações (3.5) e (3.6) é possível calcular a razão das taxas de energia para as distâncias S_1 e S_2 , obtida através de

$$I_{\eta,1}S_2^2/I_{\eta,2}S_1^2 \quad (3.7)$$

É possível comprovar que a intensidade em uma dada direção não se altera em um meio ideal. Com propriedades constantes e como não há absorção, emissão ou espalhamento, a intensidade de radiação se mantém a mesma quando a distância é alterada.

De acordo com Siegel e Howell, 2002, imagina-se duas esferas concêntricas ao redor de uma fonte diferencial, que emite energia igualmente para todas as direções, ver Fig.3.2. Se $dQ_{\eta,s}d\eta$ é a energia espectral hemisférica que deixa a fonte diferencial, os fluxos de energia que cruzam a esfera interna e externa são, respectivamente

$$dQ_{\eta,s}d\eta/4\pi S_1^2 \quad (3.8)$$

$$dQ_{\eta,s}d\eta/4\pi S_2^2 \quad (3.9)$$

A razão da energia que passa através do elemento de área dA_l quando posicionado em S_1 e em S_2 sobre as esferas interna e externa é dado por

$$\frac{\left(dQ_{\eta,s}d\eta/4\pi S_1^2\right)dA_1}{\left(dQ_{\eta,s}d\eta/4\pi S_2^2\right)dA_1} = \frac{S_2^2}{S_1^2} \quad (3.10)$$

Deste modo, a partir das relações (3.7) e (3.10) é possível concluir que

$$I_{\eta,1} = I_{\eta,2} \quad (3.11)$$

Assim, em um meio ideal, não participante, a intensidade de radiação numa dada direção é independente da posição ao longo desta direção.

3.3 Intensidade de radiação em meios participantes

São considerados meios participantes, os meios que absorvem, emitem e espalham energia radiante. Como exemplos pode-se citar os meios que contém concentrações de gases polares como o monóxido e o dióxido de carbono, o metano e o vapor d'água. O ar e os demais gases monoatômicos, ou apolares, são considerados transparentes à radiação térmica. Porém, há também partículas sólidas que, quando em suspensão, também caracterizam o meio como sendo participante, são elas principalmente a fuligem e, no caso de se utilizar carvão pulverizado como combustível, parte do combustível que ainda não foi oxidado e as cinzas.

Para se obter a intensidade de radiação através de um meio participante, utiliza-se a equação de transferência radiativa (RTE). Trata-se de uma equação diferencial que considera os principais efeitos do meio participante sobre a intensidade de radiação. Nas próximas seções serão detalhados os principais efeitos de atenuação e aumento da intensidade de radiação para formar a RTE.

3.3.1 Absorção e espalhamento

Devido à absorção e ao espalhamento, há uma atenuação da intensidade de radiação. A partir de medições experimentais, foi verificado que a alteração na intensidade de radiação depende da magnitude da intensidade local. O espalhamento possui duplo efeito, além da atenuação, também causa um aumento da intensidade de radiação, devido à intensidade radiante proveniente de outras direções. Esse aumento é tratado na seção 3.3.3.

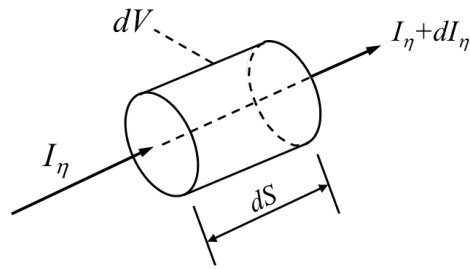


Figura 3.2 - Intensidade de radiação espectral que incide sobre um elemento de volume que absorve e espalha.

De acordo com a Fig. 3.2, I_η representa a intensidade de radiação espectral que incide na direção normal sobre um elemento de volume de espessura dS que absorve e espalha radiação. Conforme a radiação passa através de dS , a sua intensidade é reduzida devido à absorção e ao espalhamento. Insere-se um coeficiente de proporcionalidade, K_η , o qual carrega as propriedades locais do meio. Este coeficiente é uma propriedade física e é uma função da temperatura, pressão, concentração do meio e número de onda da radiação incidente

$$K_\eta = K_\eta(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha) \quad (3.12)$$

onde K_η é o coeficiente de extinção espectral do meio, em m^{-1} . Ele consiste de uma parte relacionada ao coeficiente de absorção $\kappa_\eta(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha)$ e outra relacionada ao coeficiente de espalhamento $\sigma_{s\eta}(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha)$

$$K_\eta(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha) = \kappa_\eta(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha) + \sigma_{s\eta}(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha) \quad (3.13)$$

onde os coeficientes κ_η e $\sigma_{s\eta}$ também possuem unidades de m^{-1} . De forma alternativa, autores como Smith et al., 1982, e Modest, 2003, apresentam coeficientes por unidade de massa específica ou por pressão parcial das espécies participantes. Estas formas podem ser mais convenientes, de acordo a utilização da metodologia a ser aplicada.

Caracteriza-se, então, a atenuação como

$$dI_\eta = -K_\eta(S)I_\eta dS \quad (3.14)$$

Que, ao integrar sobre um comprimento de caminho S , resulta em

$$I_\eta(S) = I_\eta(0) \exp \left[- \int_0^S K_\eta(S^*) dS^* \right] \quad (3.15)$$

onde $I_\eta(0)$ é a intensidade na origem e S^* é a variável utilizada para integração no caminho. A Equação (15) também é conhecida como Lei de Bouguer.

Com a finalidade de facilitar o entendimento da Lei de Bouguer, é usual utilizar uma quantidade adimensional definida a partir do fator exponencial

$$\tau_\eta(S) = \int_0^S K_\eta(S^*) dS^* \quad (3.16)$$

onde $\tau_\eta(S)$ representa a opacidade do caminho de comprimento S ou a espessura óptica, sendo uma função dos valores de K_η entre 0 e S , que por sua vez, varia em função de parâmetros locais p , T e \bar{c}_α . A espessura óptica mede a habilidade de uma trajetória em atenuar a radiação de um dado comprimento de onda. Conforme a espessura óptica aumenta, cresce também a atenuação. Quando o meio não apresenta variação de composição, temperatura e pressão, tem-se

$$\tau_\eta(S) = K_\eta S \quad (3.17)$$

Para $\tau_\eta(S) \gg 1$, o caminho S no meio é considerado opticamente espesso. No caso de $\tau_\eta(S) \ll 1$, o caminho S no meio é considerado opticamente fino. Neste caso, a radiação pode passar mais livremente através da trajetória sem que aconteça uma atenuação expressiva.

Na bibliografia encontrada sobre meios participantes, é usual encontrar trabalhos em que o espalhamento é negligenciado e apenas a absorção é considerada para a atenuação da intensidade de radiação. Nos casos em que realmente o espalhamento pode ser negligenciado,

$\sigma_{s\eta} \approx 0$, logo $K_\eta = \kappa_\eta$. Se for considerado ainda, um meio com propriedades uniformes, onde κ_η não é função da posição, tem-se que

$$I_\eta(S) = I_\eta(0) \exp(-\kappa_\eta S) \quad (3.18)$$

O comportamento do coeficiente de absorção é discutido em seção posterior. Devido à sua forte dependência espectral, muitos são os modelos matemáticos que buscam simular seu efeito no meio em estudo. Entre os principais, pode-se citar o modelo do gás cinza, o modelo da soma ponderada de gases cinza e também o modelo linha por linha.

No caso do espalhamento, há uma dependência do tamanho e do formato das partículas, assim como do número de onda. A amplitude do espalhamento da radiação pode ser vista em termos de seções transversais de espalhamento espectral, s_η . Uma das possibilidades de se determinar de forma experimental a seção transversal de espalhamento, se dá através da medição de um feixe incidente com um ângulo mínimo de divergência [Siegel e Howell, 2002].

A alteração na intensidade de radiação devido ao espalhamento do feixe incidente é obtida através de

$$-\frac{dI_\eta}{I_\eta} = \frac{dI_{\eta s}}{I_\eta} = \frac{\sigma_{s\eta} dA dS}{dA} = \sigma_{s\eta}(S) dS \quad (3.19)$$

onde $dI_{\eta s}$ representa a parcela espalhada da intensidade incidente, I_η é a intensidade do feixe incidente e $\sigma_{s\eta}$ é o coeficiente de espalhamento, que também pode ser considerada a área efetiva de espalhamento por unidade de volume

$$\sigma_{s\eta} = \int_{N(R)=0}^{\infty} s_\eta(R) dN(R) \quad (3.20)$$

onde $dN(R)$ é o número de partículas por unidade de volume na faixa de raio entre R e $R+dR$, e $s_\eta(R)$ representa a seção-transversal de espalhamento para uma partícula de raio R .

O aumento da intensidade de radiação a partir da intensidade espalhada de todas outras

direções no caminho de S será avaliado na seção 3.3.3.

3.3.2 Emissão

Devido ao efeito da emissão, há um aumento da intensidade de radiação. Para o cálculo deste aumento, é desenvolvida uma metodologia a partir de uma cavidade esférica negra com um volume elementar dV em sua parte central. Este volume representa o meio participante e considera-se o espaço intermediário entre o volume dV e a casca da esfera de raio R como um meio transparente (não participante), de acordo com a Fig. 3.3.

A partir da superfície dA é emitida uma intensidade de radiação espectral que incide sobre dA_s , que representa um elemento de área em dV . A intensidade sofre uma alteração em dV devido à absorção do meio, o qual possui um coeficiente de absorção $\kappa_\eta(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha)$.

A energia emitida por dA e absorvida por todo volume dV é encontrada pela integração sobre dV (sobre todos os elementos $dSdA_s$). Para levar em conta toda a energia incidente sobre dV a partir de toda superfície da cavidade negra esférica, integra-se sobre todos os ângulos sólidos.

De acordo com Siegel e Howell, 2002, a fim de manter o equilíbrio no interior da cavidade esférica, a energia emitida por dV deve ser igual àquela absorvida. A emissão espectral por um volume elementar isotérmico é

$$4\pi\kappa_\eta I_{\eta,CN}(\eta, T)dVd\eta = 4\kappa_\eta E_{\eta,CN}(\eta, T)dVd\eta \quad (3.21)$$

Esta equação é válida para volumes elementares pequenos, nos quais pode-se considerar que toda a energia emitida dentro de dV escape antes de ser reabsorvida no interior do volume.

Considera-se que a emissão seja uniforme em todas as direções. Logo, atendendo as demais condições citadas anteriormente, pode-se dividir a Eq. (3.21) por $4\pi d\eta$ e pela área da seção transversal dA_s , chegando à seguinte equação para a energia espectral emitida por um volume elementar em qualquer direção

$$dI_{\eta e}(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha) = \kappa_\eta(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha) I_{\eta,CN}(\eta, T) dS \quad (3.22)$$

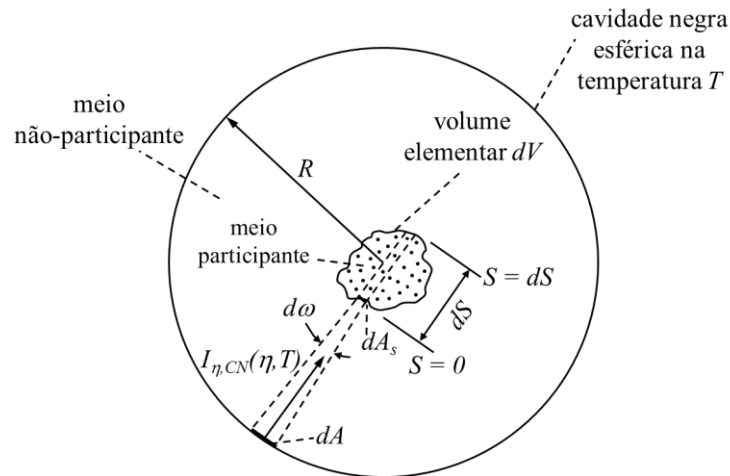


Figura 3.3 - Aumento de intensidade de radiação devido à emissão em um meio participante [Centeno, 2014, adaptado de Siegel e Howell, 2002].

3.3.3 Segundo efeito do espalhamento: o aumento da intensidade de radiação

Além da atenuação da radiação devido ao espalhamento descrita no subcapítulo 3.3.1, há também um aumento da intensidade de radiação devido ao efeito do espalhamento incidente proveniente de outras direções.

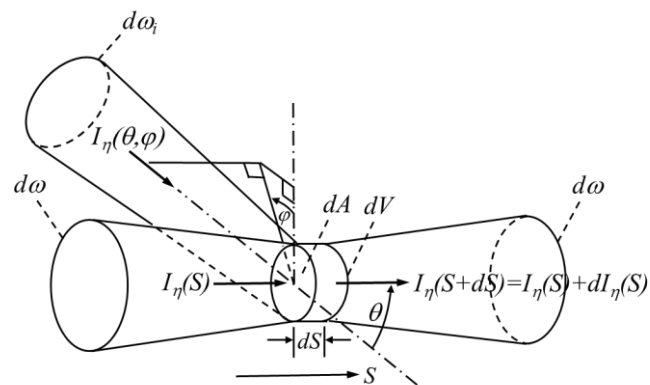


Figura 3.4 - Espalhamento de energia para dentro da direção S [Siegel e Howell, 2002].

A base para o cálculo deste aumento está na distribuição direcional da intensidade de radiação espalhada, representada por uma função de fase. Para o cálculo do espalhamento a

partir de todas as direções, considere a incidência da radiação a um ângulo (θ, φ) , com intensidade de radiação $I_\eta(\theta, \varphi)$, ver Fig. 3.4. Após esta intensidade atingir dV , ela passa por uma camada de meio participante $dS/\cos\theta$. Considerando a direção de S como sendo a principal, a intensidade espalhada a partir de $I_\eta(\theta, \varphi)$ na direção de $I_\eta(S)$ é

$$dI_{\eta,s} = \sigma_{s\eta} I_\eta(\theta, \varphi) \frac{dS}{\cos\theta} \frac{\Phi(\theta, \varphi)}{4\pi} \quad (3.23)$$

onde $\Phi(\theta, \varphi)$ representa a função de fase que descreve a distribuição angular da intensidade espalhada, dada por

$$\Phi(\theta, \varphi) = \frac{dI_{\eta,s}(\theta, \varphi)}{(1/4\pi) \int_{\omega_s=0}^{4\pi} dI_{\eta,s}(\theta, \varphi) d\omega_s} \quad (3.24)$$

A intensidade espalhada $dI_{\eta,s}(\theta, \varphi)$ na direção (θ, φ) é definida como a energia espalhada naquela direção por unidade de ângulo sólido da direção espalhada e por unidade de área normal e ângulo sólido da radiação incidente [Siegel e Howell, 2002].

Na Eq. (3.23), $dI_{\eta,s}$ é definida como a energia na direção espalhada por unidade de número de onda, por unidade de ângulo sólido espalhado, por unidade de ângulo sólido incidente, e por unidade de área normal à intensidade de radiação incidente. Para considerar as contribuições do espalhamento a partir de todas as direções (θ, φ) , integra-se sobre todos os ângulos sólidos, $d\omega_i$. É feita a consideração de que as partículas espalhadas são orientadas de forma randômica, para garantir que a seção transversal de espalhamento $\sigma_{s\eta}$ seja independente da direção incidente. O aumento de intensidade na direção S pelo espalhamento que atinge o meio é então

$$dI_{\eta,s} = \frac{\sigma_{s\eta} dS}{4\pi} \int_{\omega_i=0}^{4\pi} I_\eta(\theta, \varphi) \Phi(\theta, \varphi) d\omega_i \quad (3.25)$$

3.3.4 Equação de transferência radiativa (RTE)

A RTE é obtida a partir da soma das parcelas de atenuação e aumento, de acordo com os subcapítulos anteriores. A partir da atenuação por absorção (Eq. 3.14) e espalhamento (Eq. 3.19) com o aumento por emissão (Eq. 3.22) e espalhamento (3.25) chega-se a equação de transferência radiativa

$$\frac{dI_\eta}{dS} = -\kappa_\eta(S)I_\eta(S) + \kappa_\eta(S)I_{CN,\eta}(S) - \sigma_{s\eta}(S)I_\eta(S) + \frac{\sigma_{s\eta}(S)}{4\pi} \int_{\omega_i=0}^{4\pi} I_\eta(S, \omega_i) \Phi_\eta(\omega, \omega_i) d\omega_i \quad (3.26)$$

De acordo com Modest, 1993, os efeitos do espalhamento podem ser desprezados desde que a fração volumétrica de fuligem não ultrapasse a $8,0 \times 10^{-3}$, sendo que chamas e camadas de fumaça possuem fração volumétrica de fuligem de no máximo $1,0 \times 10^{-4}$. Para estes casos em que o meio participante não espalha, a RTE é dada por

$$\frac{dI_\eta}{dS} = -\kappa_\eta(S)I_\eta(S) + \kappa_\eta(S)I_{CN,\eta}(S) \quad (3.27)$$

Muitas vezes, na queima do metano, as parcelas de atenuação e aumento da intensidade de radiação no meio em decorrência do espalhamento são desprezadas, uma vez que a queima possui baixa formação de fuligem. Na literatura, Mazumder e Modest, 1999, e Brookes e Moss, 1999b, desconsideraram os efeitos do espalhamento no cálculo da radiação nas simulações de combustão do metano. Gupta et al., 2013, simularam a transferência radiativa em uma chama de metano e em chamas sintéticas com fração volumétrica de fuligem de até $4,0 \times 10^{-6}$ também desprezando os efeitos do espalhamento. Experimentalmente, a fração volumétrica de fuligem em uma chama de metano foi medida por Brookes e Moss, 1999a, os quais obtiveram um valor na ordem de $2,0 \times 10^{-7}$.

O presente trabalho desconsidera os efeitos do espalhamento, uma vez que o combustível em questão é o metano. A injeção de fuligem é, então, limitada de modo que as frações volumétricas no interior da câmara de combustão não ultrapassem $2,0 \times 10^{-6}$.

3.4 Modelo da soma ponderada de gases cinza

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG – do inglês: *weighted-sum-of-gray-gases*) é um dos modelos espectrais utilizado para determinação do coeficiente de absorção dos gases. Desenvolvido por Hottel e Sarofim, 1967, ele substitui a variação espectral do coeficiente de absorção por um pequeno número de gases cinza.

O conhecimento do comportamento espectral do coeficiente de absorção é necessário para a solução da equação de transferência radiativa. Na literatura são encontrados diferentes modelos, entre eles a solução linha-por-linha (LBL – do inglês: *line-by-line*), o modelo de gás cinza (GC) e o modelo WSGG.

No modelo LBL, a ETR é resolvida para todos os números de onda em que o coeficiente de absorção é fornecido ou através da aplicação de modelos espectrais. O modelo linha-por-linha fornece resultados de elevada precisão, porém esses cálculos exigem extremo esforço computacional, muitas vezes inviabilizando a aplicação acoplada para solução de problemas reais. A Fig. 3.5 mostra uma parte do espectro de absorção da água no qual é possível notar a complexidade de seu comportamento.

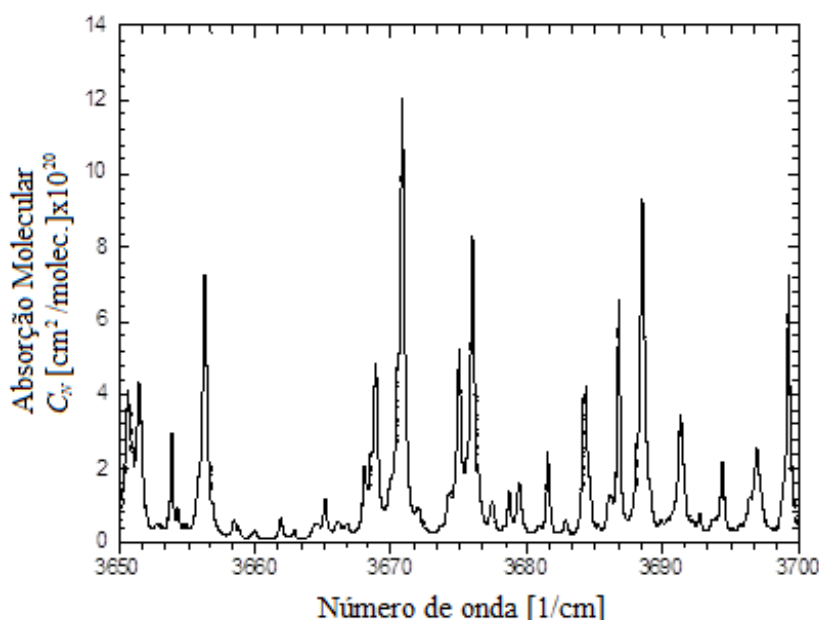


Figura 3.5 - Parte do espectro de absorção de 100% de água a 1000K
[adaptado de Galarça et al., 2008].

O modelo de gás cinza, (GC) é o mais simples e também o mais antigo. Nele o coeficiente de absorção independe do número de onda e as únicas variáveis são a temperatura e a concentração. Esse modelo apresenta uma aproximação muito rudimentar, normalmente não sendo capaz de fornecer resultados precisos. Contudo, existem correlações atuais para sua utilização como em Cassol et al., 2014.

O modelo WSGG, utilizado no presente trabalho, considera que o meio participante é composto por gases cinza, e que a parcela representativa de cada um desses gases cinza é determinada de acordo com a fração de energia radiativa no intervalo espectral em que cada gás está contido. Após o desenvolvimento do modelo por Hottel e Sarofim, 1967, e o aprimoramento por Smith et al., 1982, quando propuseram correlações para os coeficientes de absorção e para os coeficientes de ponderação tanto para as moléculas de H₂O, quanto para as moléculas de CO₂, Modest, 1991, demonstrou que o modelo WSGG pode ser usado em conjunto com qualquer método de solução para a RTE.

Atualmente, a soma ponderada de gases cinza é o modelo mais conhecido e utilizado em softwares comerciais, sendo que a escolha por este modelo leva em consideração a relação entre exigência computacional e a qualidade dos resultados, que são considerados melhores que o modelo de gás cinza.

No modelo WSGG, a emitância total ao longo de um caminho S pode ser obtida por

$$\varepsilon(pS) = \sum_{i=0}^{N_G} a_j(T) \left(1 - e^{-\kappa_j pS}\right) \quad (3.28)$$

onde N_G é o número de gases cinza considerados, a_j é o coeficiente de ponderação correspondentes ao j -ésimo gás cinza e κ_j é o coeficiente de absorção. O coeficiente a_j representa a fração de energia de um corpo negro na região do espectro correspondente ao coeficiente de absorção do gás cinza κ_j .

Os coeficientes de ponderação a_j são calculados a partir de polinômios

$$a_j(T) = \sum_{k=1}^K b_{j,k} T^{k-1} \quad (3.29)$$

onde j é o gás cinza ($j = 1, \dots, N_G$), e $K-1$ é o grau do polinômio. Ao fazer a proposta de

cálculo a partir de polinômios, Smith et al., 1982, sugeriram valores para o cálculo dos coeficientes. Porém, trabalhos mais recentes trazem novos valores para compor o modelo da soma ponderada de gases cinza [Krishnamoorthy, 2010; Dorigon et al., 2013]. Os coeficientes foram atualizados com base em dados espectrais mais atuais. Há também estudos que visam viabilizar a utilização da metodologia para estudar variações das pressões parciais das espécies [Johansson et al., 2011], uma vez que normalmente os coeficientes a_j e κ_j são ajustados para razões fixas de pressões parciais, como por exemplo $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$.

O presente trabalho utiliza os coeficientes sugeridos por Dorigon et al., 2013, que realizaram o ajuste das curvas de emitância total em relação àquelas calculadas a partir da integração LBL, conforme apresentados na Tab. 3.1.

É esperado que os coeficientes utilizados no presente trabalho sejam mais acurados que os previamente sugeridos por Smith et al., 1982, uma vez que são considerados quatro gases cinza para emular o problema ($N_G = 4$, com j variando de 0 até 4), perante os três utilizados anteriormente. As linhas espectrais foram obtidas através da base de dados espectrais HITEMP 2010 [Rothman et al., 2010].

Tabela 3.1 - Coeficientes do modelo WSGG para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ [Dorigon et al., 2013].

j	$\kappa_{g,j,p}$ [$m^{-1}atm^{-1}$]	$b_{g,j,1} \times 10^1$	$b_{g,j,2} \times 10^4$ [K^{-1}]	$b_{g,j,3} \times 10^7$ [K^{-2}]	$b_{g,j,4} \times 10^{11}$ [K^{-3}]	$b_{g,j,5} \times 10^{14}$ [K^{-4}]
1	0,192	0,5617	7,8440	-8,5630	4,2460	-7,4400
2	1,719	1,4260	1,7950	-0,1077	-0,6972	1,7740
3	11,370	1,3620	2,5740	-3,7110	1,5750	-2,2670
4	111,016	1,2220	-0,2327	-0,7492	0,4275	-0,6608

Para a obtenção dos coeficientes a_j e κ_j é feito um ajuste das emitâncias totais, com a restrição de que o somatório dos coeficientes a_j seja igual à unidade.

Pode-se escrever a equação de transferência radiante conforme

$$\frac{dI_j}{dS} = -\kappa_j I_j + \kappa_j a_j(T) I_{CN}(T) \quad (3.30)$$

com a necessidade de calcular as intensidades nas paredes, como condição de contorno [Modest, 1991]

$$I_{w,j} = a_j(T_w)I_{CN}(T_w) \quad (3.31)$$

e, através do somatório de todas as intensidades, chega-se à intensidade de radiação total

$$I = \sum_{j=0}^{N_G} I_j \quad (3.32)$$

Em Centeno, 2014, há uma consistente descrição dos métodos que são normalmente empregados no lugar do WSGG, como o modelo do gás cinza e também o modelo LBL. Os resultados são comparados quanto à precisão de seus resultados e esforço computacional, servindo de base para a escolha do modelo presente na presente pesquisa. Uma vez que o modelo LBL se mostra praticamente inviável para aplicações em mais de uma dimensão devido ao esforço computacional extremo e ao modelo do gás cinza apresentar resultados que não possuem boa aproximação ao se comparar com dados experimentais.

3.5 Avaliação das características radiantes da fuligem

De acordo com Siegel e Howell, 2002, a variação do coeficiente de absorção da fuligem em relação ao número de onda pode ser aproximada por uma relação linear, conforme

$$\kappa_{\eta,s} = \beta f_v \eta \quad (3.33)$$

Esta equação provém de análises experimentais e a utilização de relações lineares já foi explorada por outros autores [Hottel e Sarofim, 1967; Modest, 1993]. Na Eq. (3.33), f_v representa a fração volumétrica de fuligem e β é uma constante do modelo, considerada neste trabalho igual a 4,1 [Cassol et al., 2014]. A relação mostra que a dependência do coeficiente de absorção da fuligem em relação ao número de onda é mais simples do que o comportamento evidenciado na Fig. 3.5.

Neste trabalho, o modelo WSGG é utilizado para a obtenção do coeficiente de

absorção, considerando os produtos da combustão de metano-ar (gases e fuligem) em uma câmara de combustão cilíndrica. O modelo é aplicado no cálculo do campo de radiação da chama de maneira acoplada aos cálculos do escoamento reativo.

A utilização do modelo WSGG para cálculos de radiação em meios participantes que consideram a formação e a oxidação de fuligem fornece bons resultados em comparação com a solução benchmarking LBL, dentre os modelos comumente estudados [Bressloff, 1999; Demarco et al., 2011; Mossi et al., 2012; Cassol, 2013; Centeno, 2014].

Para simular a mistura de gases e fuligem utilizando o modelo WSGG, se faz necessária a consideração de um gás cinza adicional com coeficiente de absorção nulo. Ele representa as janelas transparentes no meio que contém vapor d'água e dióxido de carbono, e é calculado a partir de

$$a_{g,0} = 1 - \sum_{j=1}^{N_G} a_{g,j} \quad (3.34)$$

A obtenção do coeficiente de absorção da fuligem é realizada a partir da multiplicação do coeficiente do modelo $\kappa_{s,n,fv}$ presente na Tab. 3.2 pela fração volumétrica de fuligem e pela constante β , e, de maneira análoga à Eq. (3.29), o coeficiente de ponderação da fuligem é obtido com $j = n$. Logo, o coeficiente de absorção para a mistura é definido como

$$\kappa_j = \kappa_{g,m} + \kappa_{s,n} \quad (3.35)$$

onde o subscrito s refere-se à fuligem e g aos gases. Os coeficientes de ponderação para a mistura são definidos como

$$a_j = a_{m,n} = a_{g,m} a_{s,n} \quad (3.36)$$

observa-se que a dimensão de j é dada por $m \times n$.

Tabela 3.2 - Coeficientes do modelo WSGG para fuligem [Cassol, 2013].

n	$\kappa_{s,n,fv} [\text{m}^{-1}]$	$b_{s,n,1}$	$b_{s,n,2} [\text{K}^{-1}]$	$b_{s,n,3} [\text{K}^{-2}]$	$b_{s,n,4} [\text{K}^{-3}]$	$b_{s,n,5} [\text{K}^{-4}]$
1	22313,49	0,95552	$-1,431 \times 10^{-3}$	$9,871 \times 10^{-7}$	$-3,390 \times 10^{-10}$	$4,555 \times 10^{-14}$
2	466624,8	0,08010	$1,290 \times 10^{-3}$	$-7,874 \times 10^{-7}$	$2,322 \times 10^{-10}$	$-3,084 \times 10^{-14}$

3.6 Interações Turbulência-Radiação

Há muito se sabe que as propriedades radiativas de uma chama turbulenta possui grande dependência das flutuações turbulentas [Foster, 1969]. Os campos de temperatura e de concentração de espécies podem apresentar grandes flutuações em escoamentos reativos turbulentos, gerando variações no campo radiativo.

Mesmo quando analisados de forma independente, a radiação e a turbulência são fenômenos físicos de alta complexidade e as interações turbulência-radiação (TRI – do inglês: *Turbulence-Radiation Interactions*) relacionam estes fenômenos de modo a possibilitar a simulação de maneira conjunta.

Ao integrar a equação da transferência radiativa no espectro e fazer a média no tempo, obtém-se

$$\frac{d\bar{I}}{dS} = -\bar{\kappa}I + \bar{\kappa}I_{CN} \quad (3.37)$$

A utilização da forma integrada se faz necessária, uma vez que a RTE conforme a Eq. (3.27) somente é aplicável para quantidades instantâneas, que apresentam flutuações em um escoamento turbulento. No modelo de turbulência empregado na presente pesquisa, entretanto, são fornecidas somente quantidades temporais médias.

De acordo com Coelho, 2007, a decomposição das variáveis (concentrações das espécies e temperatura) em componentes médias e flutuantes, seguida da realização da média temporal revela outros termos que requerem modelagem, entre eles, pode-se citar: (i) autocorrelação da temperatura $\overline{T^4}$, ou valores médios relacionados que dependem apenas da temperatura, como $\overline{I_{CN}}$ e $\overline{I_{\eta,CN}}$; (ii) autocorrelação do coeficiente de absorção $\bar{\kappa}$, ou

correlações similares que dependem somente das propriedades radiativas do meio, como $\overline{\kappa_j a_j}$; (iii) correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a temperatura $\overline{\kappa T^4}$, ou correlações análogas, como $\overline{\kappa_j a_j I_{CN}}$; e (iv) correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a intensidade de radiação $\overline{\kappa I}$, ou correlações análogas, como $\overline{\kappa_j I_j}$.

O termo $\overline{\kappa I}$, que representa a correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a intensidade de radiação, é dado por

$$\overline{\kappa I} = \overline{\kappa} \bar{I} + \overline{\kappa' I'} \quad (3.38)$$

Segundo Kabashnikov e Kmit, 1979, o segundo termo $\overline{\kappa' I'}$ pode ser desprezado. Seus argumentos provêm da aproximação da flutuação opticamente fina (OTFA – do inglês: *Optically Thin Fluctuation Approximation*), que se baseia na hipótese que as flutuações do coeficiente de absorção não são correlacionadas com as flutuações da intensidade de radiação. Tem-se que $\overline{\kappa' I'} \approx 0$, se o caminho livre médio da radiação é muito maior do que a escala integral do escoamento turbulento.

Na bibliografia, muitos autores empregaram a aproximação OTFA para tratar as interações TRI [Hall e Vranos, 1994; Krebs et al., 1994; Krebs et al., 1996; Coelho, 2002; Li e Modest, 2002a e 2002b; Snegirev, 2004; Coelho, 2004; Habibi et al., 2007a e 2007b; Wang et al., 2008; Poitou et al., 2012; Centeno, 2014]. Coelho, 2007, argumenta que a hipótese OTFA pode não ser válida para todo o espectro, particularmente no centro de linhas espectrais fortes. Contudo, as zonas espectrais onde esta aproximação não se aplica não influenciam significativamente a intensidade de radiação total, tornando-se então justificável na maioria das aplicações de engenharia, com a possível exceção de chammas com altíssima concentração de fuligem. De acordo com esta hipótese, a Eq. (3.37) fica da seguinte forma

$$\frac{d\bar{I}}{dS} = -\overline{\kappa} \bar{I} + \overline{\kappa I_{CN}} \quad (3.39)$$

No presente trabalho é aplicada a aproximação descrita por Snegirev, 2004, para o termo $\overline{\kappa I_{CN}}$, o qual é proporcional à $\overline{\kappa T^4}$. A aproximação é necessária pois considera a

correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a temperatura e a autocorrelação de temperatura. Estas duas correlações das interações TRI foram encontradas como sendo as mais importantes em escoamentos reativos [Li e Modest, 2002a e 2002b; Habibi et al., 2007a e 2007b; Poitou et al., 2012; Gupta et al., 2013].

Após realizar a decomposição da temperatura e do coeficiente de absorção em componentes médios e flutuantes e substituindo a dependência $\kappa(T) = \kappa(\bar{T} + T')$ por uma série de Taylor, desprezando termos de ordens superiores, de acordo com Snegirev, 2004, tem-se que

$$\overline{\kappa T^4} = \bar{\kappa} \cdot \bar{T}^4 \left(1 + C_{TRI1} 6 \frac{\overline{T'^2}}{\bar{T}^2} + C_{TRI2} 4 \frac{\overline{T'^2}}{\bar{\kappa} \cdot \bar{T}} \left. \frac{\partial \kappa}{\partial T} \right|_{\bar{T}} \right) \quad (3.40)$$

Esta estimativa aproximada para $\overline{\kappa T^4}$ é sensível às flutuações turbulentas de temperatura. As constantes do modelo, C_{TRI1} e C_{TRI2} são 2,5 e 1,0, respectivamente, sendo o valor da constante C_{TRI1} obtido a partir de ajustes experimentais na relação $\overline{T^4}/\bar{T}^4$ e $\overline{T'^2}/\bar{T}^2$ [Burns, 1999], permitindo que a consideração da autocorrelação de temperatura fosse possível nesta formulação.

Para o cálculo do último termo da Eq. (3.40), o qual possui a derivada do coeficiente de absorção em relação à temperatura, é aplicado no presente trabalho o termo $\kappa_j a_j(T)$, no modelo WSGG, com a dependência de $a_j(T)$ dada pela Eq. (3.29).

A equação de transporte para a variância da flutuação da temperatura deve ser resolvida, Eq. (3.41), com a finalidade de se avaliar $\overline{T'^2}$, e então solucionar a Eq. (3.40).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho \bar{u} \overline{T'^2} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \rho \bar{v} \overline{T'^2} \right) = \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial r} \right) + 2 \frac{\mu_t}{Pr_t} \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{T}}{\partial r} \right)^2 - C_T \rho \overline{T'^2} \frac{\varepsilon}{k} \end{aligned} \quad (3.41)$$

onde $C_T = 2,0$ é a constante do modelo. Como condição de contorno, Snegirev, 2004, sugere que a variância da flutuação da temperatura é considerada nula nas fronteiras.

Em pesquisa numérica com escala de laboratório de uma chama turbulenta, Yadav et al., 2013, adotou a mesma formulação descrita para o tratamento das interações TRI com resultados satisfatórios. Revisões mais completas, que tratam de diferentes temas desta imensa área de pesquisa denominada interações TRI podem ser encontradas em Modest, 2005, Coelho, 2007, e Coelho, 2012.

4 APRESENTAÇÃO DO PROBLEMA FÍSICO

O problema físico da câmara de combustão cilíndrica é apresentado neste capítulo. A radiação térmica será investigada, assim como seus efeitos sobre o comportamento das variáveis do problema.

4.1 Câmara de combustão cilíndrica axissimétrica

Foi utilizada a mesma câmara de combustão analisada previamente por Magel et al., 1996a, 1996b, Nieckele et al., 2001, Silva et al., 2007, e Centeno, 2014. Foram apresentados dados experimentais de temperatura e concentração de espécies químicas para várias posições no interior da câmara, uma vez que ela foi usada como caso de teste no *First Workshop on Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces*, organizado pela ERCOFTAC (do inglês: *European Research Community on Flow Turbulence and Combustion*), em 1994 [Garréton e Simonin, 1994]. A câmara é cilíndrica, com geometria detalhada na Fig. 4.1.

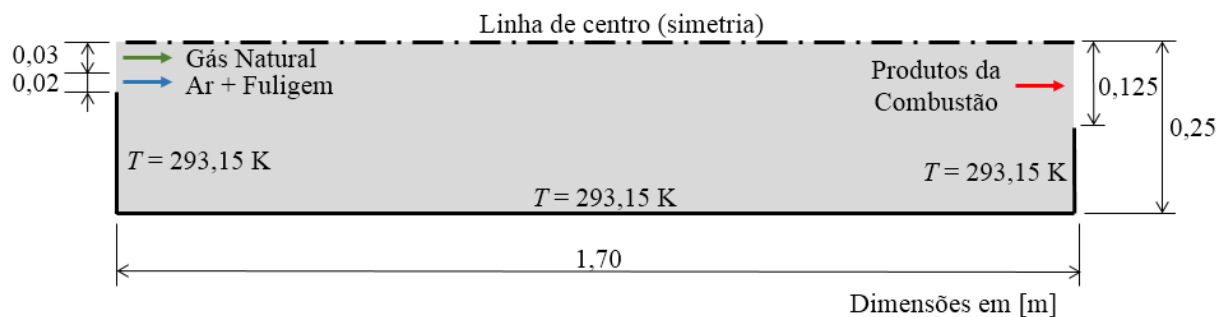


Figura 4.1 – Esquema de representação física da câmara de combustão em estudo.

Um bico injetor cilíndrico, situado na linha central, abastece a câmara de combustão com gás natural (GN). A geometria do queimador é formada também por uma abertura anelar que injeta ar logo ao lado da entrada de combustível.

A composição mássica do ar de entrada é considerada como sendo composta de 23% de oxigênio (O_2), 76% de nitrogênio (N_2) e 1% de vapor de água (H_2O). Conforme sugerido por Garréton e Simonin, 1994, assume-se o gás natural como sendo composto de 90% de metano (CH_4) e 10% de nitrogênio. Há um excesso de combustível de 5%, resultando em uma

vazão mássica de combustível de $0,01453 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$ com uma temperatura de $313,15 \text{ K}$, e em uma vazão mássica de ar de $0,1988 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$ com uma temperatura de $323,15 \text{ K}$.

Para a entrada do combustível, há um duto cilíndrico de $0,06 \text{ m}$ de diâmetro e considera-se que o ar entre por um anel adjacente com $0,02 \text{ m}$ de vão anular, externo ao duto de combustível. Para as vazões consideradas, as velocidades de injeção foram de $7,23 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ para o combustível e $36,29 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ para o ar. Para estas velocidades, o número de Reynolds médio entre as correntes de ar e combustível na região de entrada foi calculado em 17925 , dando ao escoamento a característica de escoamento turbulento.

Nos casos em que foi considerada a injeção de fuligem, ela entra em conjunto com o ar, numa fração volumétrica máxima na ordem de 10^{-6} , de modo a não alterar significativamente os demais dados de entrada do problema.

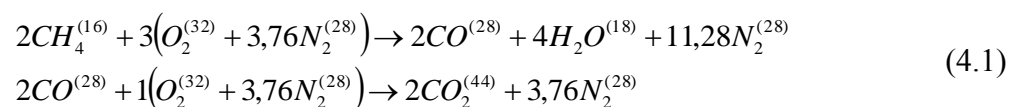
Assume-se que o processo de combustão ocorra em regime permanente.

O domínio de cálculo é assumido como sendo apenas uma fração angular representativa da câmara (1 rad), em função da axissimetria do problema. Diversas áreas de pesquisa realizam esta simplificação para a modelagem da turbulência, embora uma das suas características fenomenológicas seja justamente possuir uma natureza tridimensional, incluem-se trabalhos que estudam a combustão turbulenta [Pember et al., 1996; Magel et al., 1996a; Magel et al., 1996b; Nieckele et al., 2001; Li e Modest, 2002a; Li e Modest, 2002b; Silva et al., 2007; Saqr et al., 2010].

Demais equipamentos e componentes externos à câmara de combustão, como sopradores, dutos, reservatórios, etc., não fazem parte do domínio de cálculo avaliado. Considera-se que estão intrinsicamente participando do problema na representação das condições de entrada da câmara. Como informação adicional, a potência nominal do queimador utilizado é de 600 kW .

Em virtude das altas velocidades impostas no interior da câmara pelo queimador, as forças de empuxo são desprezadas. Logo, considera-se que o escoamento seja governado principalmente pelas forças de inércia.

Considera-se que o processo de combustão ocorra em duas etapas globais, são elas



onde os termos sobrescritos representam as massas moleculares de cada espécie química, em $\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$.

Define-se o problema como: dada a geometria da câmara, calcular a distribuição da concentração de fuligem, antes e após a injeção externa, assim como as alterações no termo fonte de calor radiante e no fluxo de calor sentido na parede da câmara, partindo de códigos já utilizados anteriormente e validados quanto à sua boa concordância com dados experimentais e resultados considerados *benchmark*.

4.2 Condições de contorno

Nas paredes da câmara de combustão, conforme indicado por Garréton e Simonin, 1994, a temperatura é prescrita e constante, igual a 293,15 K. Condições de não-deslizamento e impermeabilidade são impostas nas paredes, sendo a viscosidade aparente nestas regiões determinada através de funções de parede acopladas ao modelo de turbulência $k - \varepsilon$.

Assume-se que a componente radial da velocidade é nula no eixo de simetria, assim como o gradiente de velocidade, a energia cinética turbulenta e sua dissipação, temperatura (entalpia) e concentrações de espécies. Foi considerado um escoamento uniforme na direção axial na seção de entrada da câmara, com perfil de concentração também uniforme para combustível e ar.

A energia cinética turbulenta é dada por

$$k = \frac{3}{2} (\bar{u}_{ent} IT)^2 \quad (4.2)$$

onde IT representa a intensidade de turbulência, igual a 6% para a corrente de ar e 10% para a corrente de combustível e \bar{u}_{ent} representa a velocidade axial média na entrada. Para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta tanto no interior da câmara quanto nas paredes, foi utilizada a metodologia descrita inicialmente por Garréton e Simonin, 1994, com os mesmos valores utilizados por Nieckele et al., 2001, Silva et al., 2007 e Centeno, 2014.

Na saída da câmara de combustão, as distribuições de energia cinética turbulenta e de sua dissipação, as distribuições de temperatura e de concentrações de espécies, assim como a componente radial da velocidade são assumidas como localmente parabólicas. Para determinar a condição de contorno da velocidade axial \bar{u} na saída, o perfil de velocidades

nesta posição foi corrigido por um fator com a finalidade de conservar a massa e evitar contrafluxos [Silva, 2005]. As temperaturas nas paredes e na entrada foram prescritas e a temperatura na saída foi calculada como a temperatura média de mistura do escoamento na saída

$$\bar{T}_{bulk} = \frac{\int_A \bar{\rho} \bar{u} c_p \bar{T} dA}{\int_A \bar{\rho} \bar{u} c_p dA} \quad (4.3)$$

onde \bar{T}_{bulk} representa a temperatura da mistura, e c_p representa o calor específico da mistura à pressão constante. A variância da flutuação de temperatura foi considerada nula na entrada e nas paredes da câmara. Tanto as paredes quanto as áreas de entrada e saída foram assumidas como superfícies negras para a solução da RTE.

Em Centeno et al., 2014, é discutida a influência de variações nas condições turbulentas de entrada e também é realizada a verificação da importância das forças de empuxo. Os resultados obtidos com o modelamento, que serve como base para o presente trabalho, são comparados com resultados da literatura

4.3 Propriedades termofísicas

Para a resolução do problema, assume-se que a viscosidade dinâmica, a viscosidade cinemática e a difusividade sejam constantes e iguais as do nitrogênio, respectivamente com os seguintes valores: $\mu = 2,97 \times 10^{-5} N.s.m^{-2}$, $\nu = 51,8 \times 10^{-6} m^2.s^{-1}$, e $D = 2,88 \times 10^{-5} m^2.s^{-1}$. Também é adotada a difusividade do nitrogênio para todas as espécies químicas, pois é a espécie em maior quantidade na mistura. Os números de Prandtl e de Schmidt turbulentos foram ambos considerados iguais a 0,9. Tais propriedades termofísicas foram obtidas em Nieckele et al., 2001; e Silva, 2005.

Os valores das entalpias molares de formação padrão de cada espécie química são apresentados na Tab. 4.1:

Tabela 4.1 - Entalpia molar de formação padrão a 298,15 K e 1 atm [Turns, 2000].

$\bar{h}_{CH_4}^0$ [J/kmol]	$-7,4831 \times 10^7$
$\bar{h}_{CO_2}^0$ [J/kmol]	$-3,93546 \times 10^8$
$\bar{h}_{H_2O}^0$ [J/kmol]	$-2,41845 \times 10^8$
$\bar{h}_{O_2}^0$ [J/kmol]	0,00
$\bar{h}_{N_2}^0$ [J/kmol]	0,00
\bar{h}_{CO}^0 [J/kmol]	$-1,10541 \times 10^8$

Com a exceção do calor específico da mistura de gases (CH_4 , O_2 , H_2O , CO_2 , CO e N_2) usado para pós-processamento da temperatura, as demais propriedades termofísicas presentes no problema são consideradas constantes para cada substância. O calor específico a pressão constante de cada espécie foi determinado utilizando as correlações sugeridas por Turns, 2000, sendo que o calor específico da mistura foi obtido a partir de uma média ponderada pelas frações mássicas das espécies.

A Tab. 4.2 apresenta os parâmetros utilizados para a determinação das taxas de reação pelo modelo de Arrhenius, conforme Cap. 2. A energia de ativação da primeira reação apresentada pela Eq. (4.1) foi ajustada para $2,3 \times 10^8$ J·kmol⁻¹ para que os resultados numéricos se aproximassem melhor dos resultados experimentais [Centeno, 2014].

Tabela 4.2 - Parâmetros de cada reação para cálculo da taxa pelo modelo de Arrhenius [Turns, 2000].

Reação	A_k (m ³ .s ⁻¹ .kmol ⁻¹)	E_k (J.kmol ⁻¹)	β_k	γ_{CH_4}	γ_{O_2}	γ_{CO_2}	γ_{CO}	γ_{H_2O}
1 Eq (4.1)	$2,8 \times 10^{12}$	$2,03 \times 10^8$	0	-0,3	1,3	-	-	-
2 Eq (4.1)	$2,91 \times 10^{15}$	$1,67 \times 10^8$	0	-	0,25	-	1	-

Para ambos os casos, considera-se que o comportamento dos gases dentro da câmara de combustão apresente características de gás perfeito. Segundo Spalding, 1979, esta aproximação é possível devido à câmara operar em pressões próximas à pressão atmosférica.

5 MÉTODOS NUMÉRICOS E AVALIAÇÃO DA MODELAGEM MATEMÁTICA

A base do código utilizado no presente trabalho foi adaptada inicialmente do algoritmo de propósitos gerais de Patankar por Silva, 2005. O autor buscava simular numericamente o escoamento reativo no interior de uma câmara de combustão cilíndrica com as mesmas características físicas. Foram alteradas as condições de contorno e propriedades termofísicas. Também houve a adição dos termos fonte das equações de conservação. O código foi escrito e implementado em linguagem Fortran 90. Centeno, 2014, alterou algumas rotinas com a finalidade de atualizar o modelamento da radiação térmica. Em sua revisão, o método das zonas foi substituído pelo método de ordenadas discretas, o que lhe permitiu empregar diversos modelos espectrais, inclusive o modelo LBL, para comparações com soluções *benchmarking*, assim como considerar a não-homogeneidade do meio participante e as interações TRI. Este código vem sendo desenvolvido pelo grupo de radiação do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Na nova sub-rotina de cálculos de radiação, o termo fonte de calor radiativo, $\overline{S_{rad}}$, é calculado como o negativo do divergente do fluxo de calor radiativo, utilizando para isto o método de ordenadas discretas em coordenadas cilíndricas axissimétricas. Esta sub-rotina fornece como resultado um termo fonte de calor radiativo com unidades de $W \cdot m^{-3}$, compatível com os demais termos fonte da equação de energia implementada no programa principal. O coeficiente de absorção dos gases participantes foi modelado pelo modelo WSGG e as interações TRI foram consideradas no cálculo do campo de radiação. O algoritmo possibilita a utilização do modelo LBL, empregando-o em cálculos desacoplados radiação-CFD (nos quais se utilizam campos prescritos de temperatura e frações molares das espécies gasosas e fuligem para o cálculo do campo de radiação), com o objetivo de avaliar quantitativamente os modelos WSGG e GC.

As equações são resolvidas de forma acoplada a cada iteração executada pelo programa. São empregadas sub-relaxações devido à possibilidade de divergência na solução numérica. Os valores dos fatores de sub-relaxação usados na solução das equações de energia, de espécies químicas, de quantidade de movimento, de energia cinética turbulenta e de dissipação da energia cinética turbulenta foram de 0,1. Para o termo fonte de calor radiativo, a fim de evitar a divergência da solução, foi utilizado um fator de sub-relaxação de 0,01. Foi utilizado também um fator de sub-relaxação para a correção da pressão, para a massa

específica, para o termo fonte de reação química e para a viscosidade turbulenta, também de 0,1. Os termos fontes destas equações de conservação foram, quando necessário, discretizados em diferenças finitas e implementados segundo a técnica de linearização apresentada por Patankar, 1980, sendo então inserido no termo b da Eq. (5.8) e no coeficiente a_P da Eq. (5.9).

Em todos os casos investigados no presente trabalho, as soluções foram consideradas convergidas quando o somatório dos resíduos normalizados no método SIMPLE foram inferiores a 10^{-8} , e a variação relativa máxima entre iterações para as demais equações era inferior a 10^{-6} .

O método de volumes finitos é aplicado para integrar as equações governantes do problema, entre elas, as equações da conservação de massa, de energia, de quantidade de movimento, de energia cinética turbulenta e de sua dissipação e de espécies químicas, Equações (2.2), (2.3), (2.11), (2.12), (2.13), (2.14) e (2.21), respectivamente, assim como a Equação (2.26) para fração mássica de fuligem, e a equação de transporte para a variância da flutuação de temperatura, Eq. (3.41). Apresenta-se também neste capítulo a abordagem numérica utilizada na solução da RTE (Eq. 3.27), determinante para a solução do termo fonte radiativo ($\overline{S_{rad}}$), que é parte da equação da conservação de energia [Ferziger e Perić, 1997; Patankar, 1980; Maliska, 2003; Versteeg e Malalasekera, 2007].

5.1 Método de volumes finitos

Para a aplicação do esquema numérico, é conveniente escrever as equações que descrevem o processo da combustão na forma de uma equação genérica. A forma generalizada das equações de conservação, Equações (2.2), (2.3), (2.11), (2.12), (2.13), (2.14), (2.21), (2.26), e (3.41), para uma variável genérica ϕ em coordenadas cilíndricas axissimétricas e em regime permanente, é dada por

$$\frac{\partial}{\partial z}(\bar{\rho}\bar{u}\phi) + \frac{\partial}{\partial r}(\bar{\rho}\bar{v}\phi) = \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial z}\right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\left(r\Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial r}\right) + \overline{S^\phi} \quad (5.1)$$

onde ϕ é a variável genérica que representa as variáveis do problema (velocidades, entalpia, frações mássicas das espécies químicas gasosas e da fuligem, energia cinética turbulenta e sua dissipação, variância da flutuação de temperatura). O termo Γ_ϕ representa o coeficiente

difusivo, que assume valores específicos de acordo com cada caso, assim como o termo fonte genérico médio, $\overline{S^\phi}$. São apresentados os valores e equações específicas de ϕ , Γ_ϕ , e $\overline{S^\phi}$ para cada caso na Tab. 5.1

A Fig. 5.1 mostra de forma esquemática a situação bidimensional de um volume de controle genérico e seus vizinhos, em coordenadas cilíndricas axissimétricas.

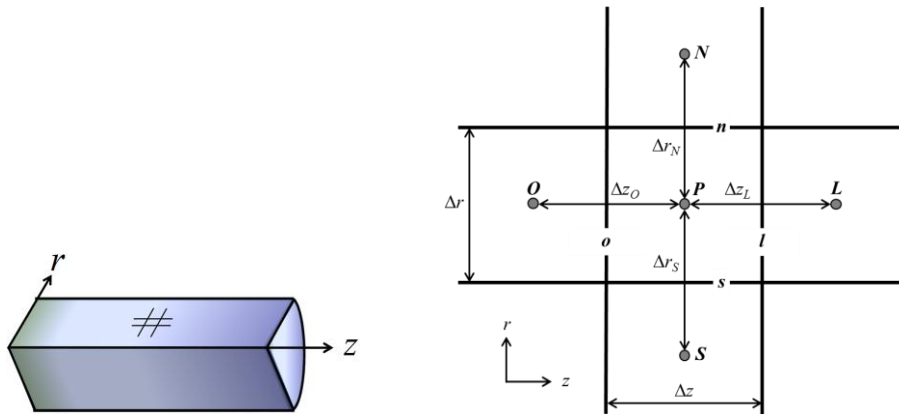


Figura 5.1 – Situação bidimensional do volume de controle genérico e seus vizinhos.

O fluxo total médio da variável genérica é definido por

$$\bar{J} = (\text{Fluxo advectivo de } \phi) + (\text{Fluxo difusivo de } \phi) \quad (5.2)$$

dessa forma, os fluxos médios nas direções axial e radial são, respectivamente,

$$\bar{J}_z = \bar{\rho} \bar{u} \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \quad (5.3)$$

$$\bar{J}_r = \bar{\rho} \bar{v} \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial r} \quad (5.4)$$

Substituindo os termos e integrando no volume de controle genérico, a Eq. (4.1) passa a ser escrita da seguinte forma

$$\int_s^n \int_l^o \left(\frac{\partial}{\partial z} (\overline{J_z}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \overline{J_r}) - \overline{S^\phi} \right) dz dr = 0 \quad (5.5)$$

Adota-se, na fronteira dos volumes, a média harmônica para tratar os coeficientes difusivos das equações. Para representar o fluxo convectivo de massa por unidade de área, F , e a condutância difusiva, D , nas faces do volume de controle, definem-se duas variáveis, as quais são escritas para o volume de controle genérico da Fig. 5.1 conforme

$$F_{z,l} = \rho u_l; \quad F_{z,o} = \rho u_o; \quad F_{r,n} = \rho v_n; \quad F_{r,s} = \rho v_s \quad (5.6)$$

$$D_{z,l} = \frac{\Gamma_l}{\Delta z_l}; \quad D_{z,o} = \frac{\Gamma_o}{\Delta z_o}; \quad D_{r,n} = \frac{\Gamma_n}{\Delta r_n}; \quad D_{r,s} = \frac{\Gamma_s}{\Delta r_s} \quad (5.7)$$

O esquema de interpolação conhecido como *Power Law* [Patankar, 1980], é adotado para tratar os termos advectivos discretizados. A interpolação é necessária para possibilitar o cálculo do valor da variável ϕ nas faces do volume de controle. Aplicando-se o esquema, obtém-se a equação algébrica a seguir como resultado da integração da Eq. (5.5)

$$a_p \phi_p = a_L \phi_L + a_O \phi_O + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (5.8)$$

onde b é um termo dado por $S_C \Delta V$, proveniente da linearização do termo fonte [Patankar, 1980]. Os coeficientes a_P , a_L , a_O , a_N e a_S são

$$\begin{aligned} a_L &= \left\{ D_{z,l} A \left(Pe_{z,l} \right) + \max[-F_{z,l}, 0] \right\} \Delta r \\ a_O &= \left\{ D_{z,o} A \left(Pe_{z,o} \right) + \max[F_{z,o}, 0] \right\} \Delta r \\ a_N &= \left\{ D_{r,n} A \left(Pe_{r,n} \right) + \max[-F_{r,n}, 0] \right\} \Delta z \\ a_S &= \left\{ D_{r,s} A \left(Pe_{r,s} \right) + \max[F_{r,s}, 0] \right\} \Delta z \\ a_P &= a_L + a_O + a_N + a_S - S_P \Delta V \end{aligned} \quad (5.9)$$

Tabela 5.1 - Identificação da variável genérica, ϕ , coeficiente difusivo, Γ_ϕ , e termos fontes, $\overline{\dot{S}^\phi}$, das equações de conservação que modelam o processo de combustão turbulenta [adaptado de Centeno, 2014].

Eq.	ϕ	Γ_ϕ	$\overline{\dot{S}^\phi}$
(2.2)	1	0	0
(2.11)	\bar{u}	$(\mu + \mu_t)$	$-\frac{\partial p^*}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)$
(2.12)	\bar{v}	$(\mu + \mu_t)$	$-\frac{\partial p^*}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) - \frac{(\mu + \mu_t) \bar{v}}{r^2} + \frac{\rho \bar{w}^2}{r^2}$
(2.5)	$r \bar{w}$	$(\mu + \mu_t)$	$-2 \frac{(\mu + \mu_t)}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{w})$
(2.24)	\bar{h}	$\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right)$	$\overline{S_{rad}} + \sum_{\alpha} \left[\bar{h}_{\alpha}^0 + \int_{\bar{T}_{ref}}^{\bar{T}} c_{p,\alpha} dT \right] \overline{R_{\alpha}}$
(2.13)	k	$\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right)$	$\left[\mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \right] - \bar{\rho} \varepsilon$
(2.14)	ε	$\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon}} \right)$	$C_{1,\varepsilon} \left[\mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \right] \frac{\varepsilon}{k} - C_{2,\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k}$
(2.21) $\alpha = \text{CH}_4$	$\overline{y_{\text{CH}_4}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{\text{CH}_4}}$
(2.21) $\alpha = \text{O}_2$	$\overline{y_{\text{O}_2}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{\text{O}_2}}$
(2.21) $\alpha = \text{CO}_2$	$\overline{y_{\text{CO}_2}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{\text{CO}_2}}$
(2.21) $\alpha = \text{CO}$	$\overline{y_{\text{CO}}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{\text{CO}}}$
(2.21) $\alpha = \text{H}_2\text{O}$	$\overline{y_{\text{H}_2\text{O}}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{\text{H}_2\text{O}}}$
(2.26)	$\overline{y_s}$	(μ_t / Sc_t)	$\overline{R_s}$
(3.41)	$\overline{T'^2}$	$\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right)$	$2 \frac{\mu_t}{Pr_t} \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{T}}{\partial r} \right)^2 - C_T \rho \overline{T'^2} \frac{\varepsilon}{k}$

sendo que o termo S_p também é proveniente da técnica de linearização do termo fonte. Os termos $Pe_{z,l}$, $Pe_{z,o}$, $Pe_{r,n}$, $Pe_{r,s}$ do grupo de Equações (5.9) são números de Peclet, avaliados nas respectivas faces l , o , n e s do volume de controle, e são dados por

$$Pe_{z,l} = \frac{F_{z,l}}{D_{z,l}}; Pe_{z,o} = \frac{F_{z,o}}{D_{z,o}}; Pe_{r,n} = \frac{F_{r,n}}{D_{r,n}}; Pe_{r,s} = \frac{F_{r,s}}{D_{r,s}} \quad (5.10)$$

São inseridas as funções de interpolação nos termos $A(|Pe|)$ das Equações (5.9) que, de acordo com o esquema *Power Law*, podem ser escritas para qualquer valor de Pe como

$$\max[0, (1 - 0,1|Pe|)^5] \quad (5.11)$$

Na literatura é possível encontrar outros esquemas de interpolação, como o *upwind*, o híbrido, o de diferenças centrais e o QUICK (do inglês: *quadratic upwind interpolation for convective kinematics*). Foi escolhido o esquema *Power Law* por apresentar bom equilíbrio entre exigência computacional e precisão dos resultados e também por ele já estar implementado no algoritmo de propósitos gerais de Patankar, utilizado como base para esta pesquisa.

Um importante termo que aparece nas equações de conservação de quantidade de movimento é o gradiente de pressão, sua solução é considerada um problema complexo, uma vez que não existe equação de transporte, ou assemelhada, para pressão. Para escoamentos incompressíveis, existe a possibilidade de acoplar o cálculo de pressão e de velocidade, com a introdução de uma restrição: se o campo de pressão correto for aplicado nas equações de conservação de quantidade de movimento, o campo de velocidades resultante deverá satisfazer a equação da continuidade.

O problema do **acoplamento pressão-velocidade** é resolvido na presente pesquisa a partir da estratégia de solução iterativa denominada algoritmo SIMPLE (do inglês: *Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*), apresentado originalmente em Patankar e Spalding, 1972, e amplamente difundidos na literatura [Patankar, 1980; Versteeg e Malalasekera, 2007].

No algoritmo SIMPLE, um campo de pressão inicialmente estimado é utilizado para

resolver as equações da conservação de quantidade de movimento e uma equação de correção de pressão, deduzida da equação da continuidade, é resolvida para obter um campo de correção de pressão que é utilizado para atualizar os campos de velocidade e de pressão. Enquanto os fluxos convectivos de massa por unidade de área nas faces dos volumes de controle, F , são avaliados a partir de estimativas para os componentes da velocidade. Conforme avança o algoritmo, objetiva-se progressivamente melhorar os campos estimados. O processo iterativo continua até a convergência dos campos de velocidade e de pressão.

Uma vez realizada a discretização das equações governantes do processo de combustão turbulenta, se faz necessário resolver um **sistema de equações algébricas lineares**. A partir das dimensões do problema, do número de volumes utilizados na malha, dos métodos utilizados para descrever os termos advectivos e o acoplamento pressão-velocidade, se determina a complexidade e o tamanho do grupo de equações a serem resolvidas.

O algoritmo TDMA (do inglês: *Tri-Diagonal Matrix Algorithm*, também conhecido por algoritmo de Thomas), foi utilizado para a solução do sistema de equações algébricas lineares, utilizado em conjunto com a técnica da correção em bloco (com exceção para a energia cinética turbulenta e sua dissipação), que auxilia a entrada das informações das condições de contorno para o interior do domínio [Patankar, 1980]. Sendo um método iterativo, em seu algoritmo é possível alterar a velocidade de convergência quando se alterna as direções de varredura, buscando incorporar as informações das condições de contorno de maneira mais eficientes aos cálculos numéricos [Patankar, 1980; Maliska, 2003; Versteeg e Malalasekera, 2007]. Numa geometria bidimensional, por exemplo, a técnica é desenvolvida através de quatro varreduras alternadas: norte-sul, sul-norte, leste-oeste, oeste-leste.

Da mesma forma que o esquema de interpolação *Power Law*, a presente pesquisa aplica os algoritmos SIMPLE e TDMA por já terem sido implementados e validados por Patankar em seu algoritmo de propósitos gerais.

5.2 Métodos das ordenadas discretas

O método das ordenadas discretas é utilizado para a solução da equação de transferência radiativa (RTE) na presente pesquisa, a escolha leva em consideração as características e exigências de cada um dos problemas de acordo com a aplicação. O método faz uma representação discreta da dependência direcional da intensidade radiativa, ou seja, a

solução para o problema de transporte radiativo é encontrada resolvendo a RTE para um conjunto de direções discretas cobrindo toda a faixa do ângulo sólido de 4π sr. Posteriormente, a RTE é escrita para cada ordenada direcional discreta e os termos integrais são substituídos por quadraturas numéricas que são somadas para todas as direções discretas.

Através do negativo do divergente do fluxo de calor radiativo, tem-se o efeito da transferência de calor radiativa presente na equação da conservação de energia, Eq (2.3)

$$\overline{S_{rad}} = -\nabla \cdot \vec{q}_{rad} = \int \int_{\omega \eta} (\kappa_{\eta} I_{\eta} - \kappa_{\eta} I_{CN\eta}) d\eta d\omega \quad (5.12)$$

onde $I_{CN\eta}$ é a intensidade espectral de corpo negro, I_{η} é a intensidade espectral, que também é função da posição e da direção e η é o número de onda. A variação da intensidade espectral, I_{η} , é definida após resolver a RTE

$$\frac{dI_{\eta}}{dS} = \kappa_{\eta}(S)I_{CN\eta}(S) - (\kappa_{\eta}(S) + \sigma_{s\eta}(S))I_{\eta}(S, \vec{s}) + \frac{\sigma_{s\eta}(S)}{4\pi} \int_{4\pi} I_{\eta}(S, \vec{s}') \Phi_{\eta}(S, \vec{s}, \vec{s}') d\omega' \quad (5.13)$$

que considera que o meio absorva, emita e espalhe radiação, onde ε_w representa a emissividade da parede, S a posição, \vec{s} é a direção correspondente ao ângulo sólido $d\omega$, \vec{s}' é a direção correspondente ao ângulo sólido $d\omega'$. Como condição de contorno, tem-se que

$$I_{\eta}(S_w, \vec{s}) = \varepsilon_w I_{CN,\eta}(S_w) + \frac{1 - \varepsilon_w}{\pi} \int_{\vec{n} \cdot \vec{s}' < 0} I_{\eta}(S_w, \vec{s}') |\vec{n} \cdot \vec{s}'| d\omega' \quad (5.14)$$

considerando uma superfície difusa e cinza, onde \vec{n} é um vetor na direção normal à parede.

O método de ordenadas discretas (DOM) é também conhecido como aproximação S_N , onde N é a ordem da aproximação (número de valores discretos de cossenos diretores a serem considerados). Em geral, o número total de direções ordenadas, M , está relacionado à ordem da aproximação, N , através da relação $M = 2^d N(N+2)/8$, onde d representa a dimensionalidade do problema.

A Eq. (5.13) é resolvida para um conjunto de M diferentes direções \vec{s}_m , $m = 1, 2, \dots, M$, e as integrais sobre a direção devem ser substituídas por quadraturas numéricas, como

$$\int_{4\pi} f(\vec{s}) d\omega \cong \sum_{m=1}^M w_m f(\vec{s}_m) \quad (5.15)$$

onde w_m representam os pesos das quadraturas associados com as direções \vec{s}_m . Assim, a Eq. (5.13) é aproximada por um conjunto de M equações a partir de

$$\frac{dI_\eta(S, \vec{s}_m)}{dS} = \kappa_\eta(S) I_{CN\eta}(S) - (\kappa_\eta(S) + \sigma_{s\eta}(S)) I_\eta(S, \vec{s}_m) + \frac{\sigma_{s\eta}(S)}{4\pi} \sum_{m'=1}^M w_{m'} I_\eta(S, \vec{s}_m) \Phi_\eta(S, \vec{s}_m, \vec{s}_{m'}) \quad (5.16)$$

com $m = 1, 2, \dots, M$, sujeita às condições de contorno

$$I_\eta(S_w, \vec{s}_m) = \varepsilon_w I_{CN\eta}(S_w) + \frac{1 - \varepsilon_w}{\pi} \sum_{\vec{n} \cdot \vec{s}_{m'} < 0} w_{m'} I_\eta(S_w, \vec{s}_{m'}) |\vec{n} \cdot \vec{s}_{m'}|; \quad \vec{n} \cdot \vec{s}_m > 0 \quad (5.17)$$

Após a realização dos cálculos das intensidades, as quantidades integradas de forma direcional podem ser determinadas. O fluxo de calor radiativo espectral, dentro do meio (ou em uma superfície), é determinado a partir de

$$\vec{q}_{rad\eta}(S) = \int_{4\pi} I_\eta(S, \vec{s}) \vec{s} d\omega \cong \sum_{m=1}^M w_m I_{m\eta}(S) \vec{s}_m \quad (5.18)$$

De forma análoga, o divergente do fluxo de calor radiativo é determinado como

$$\nabla \cdot \vec{q}_{rad\eta} = \kappa_\eta \left(4\pi I_{CN\eta} - \int_{4\pi} I_\eta d\omega \right) = \kappa_\eta \left(4\pi I_{CN\eta} - \sum_{m=1}^M w_m I_{m\eta}(S) \right) \quad (5.19)$$

Considerando uma geometria cilíndrica axissimétrica, a RTE é escrita para cada direção ordenada individual, m , de duas forma diferentes, primeiro em base espectral e depois desprezando a dependência espectral, respectivamente conforme

$$\begin{aligned} \frac{\mu_m}{r} \frac{\partial(rI_{m\eta})}{\partial r} + \xi_m \frac{\partial I_{m\eta}}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial(\xi_m I_{m\eta})}{\partial \varphi} &= \kappa_\eta I_{CN\eta} - K_\eta I_{m\eta} + \frac{\sigma_{s\eta}}{4\pi} \sum_{m'} w_{m'} \Phi_{m'm,\eta} I_{m'\eta} \\ \frac{\mu_m}{r} \frac{\partial(rI_m)}{\partial r} + \xi_m \frac{\partial I_m}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial(\xi_m I_m)}{\partial \varphi} &= \kappa I_{CN} - KI_m + \frac{\sigma_s}{4\pi} \sum_{m'} w_{m'} \Phi_{m'm} I_{m'} \end{aligned} \quad (5.20)$$

onde μ_m , ξ_m , ζ_m são os cossenos diretores de uma direção ordenada, φ é o ângulo de revolução ao redor do eixo z e os valores de m e m' representam as direções de saída e de chegada, respectivamente. Considerando a aproximação S_6 com geometria bidimensional, são apresentados na Tab. 5.2 os valores dos cossenos diretores, sendo o fator peso $w_m = 0,5236$ usado para todas as direções.

Tabela 5.2 - Cossenos diretores para a aproximação S_6 para geometria bidimensional.

Direção (m)	Componente radial (μ_m)	Componente axial (ξ_m)	Direção (m)	Componente radial (μ_m)	Componente axial (ξ_m)
1	-0,224556	-0,948235	13	-0,948235	0,224556
2	0,224556	-0,948235	14	-0,689048	0,224556
3	-0,689048	-0,689048	15	-0,224556	0,224556
4	-0,224556	-0,689048	16	0,224556	0,224556
5	0,224556	-0,689048	17	0,689048	0,224556
6	0,689048	-0,689048	18	0,948235	0,224556
7	-0,948235	-0,224556	19	-0,689048	0,689048
8	-0,689048	-0,224556	20	-0,224556	0,689048
9	-0,224556	-0,224556	21	0,224556	0,689048
10	0,224556	-0,224556	22	0,689048	0,689048
11	0,689048	-0,224556	23	-0,224556	0,948235
12	0,948235	-0,224556	24	0,224556	0,948235

A direção \vec{s}_m pode ser vista como um ponto sobre a superfície de uma esfera unitária com a qual se associa uma área superficial, w_m , conforme a Fig. 5.2. Os cossenos diretores de

uma direção discreta \vec{s}_m , são μ_m, ξ_m, ζ_m , e satisfazem a identidade $\mu_m^2 + \xi_m^2 + \zeta_m^2 = 1$. Os w_m representam pesos das quadraturas angulares e precisam satisfazer o requisito de que o seu somatório para todas as direções discretas equivalha à área superficial de uma esfera. São escolhidas um total de M direções e as áreas angulares são medidas em unidades de 4π , tal que $\sum_{m=1}^M w_m = 1$. Os ângulos ϕ e ψ são utilizados para localizar o vetor direcional unitário \vec{s}_m .

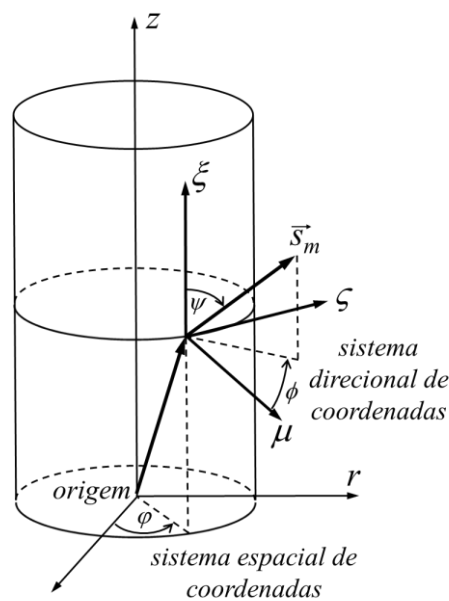


Figura 5.2 - Sistemas espacial e direcional de coordenadas para geometria cilíndrica [adaptado de Menart, 2000].

Após realizar a integração da Eq. (5.20) que despreza a dependência espectral sobre um volume de controle arbitrário, chega-se à

$$\begin{aligned} & \mu_m(A_n I_{mn} - A_s I_{ms}) + \xi_m(A_l I_{ml} - A_o I_{mo}) - (A_n - A_s) \frac{1}{w_m} (\alpha_{m+1/2} I_{m+1/2,p} - \alpha_{m-1/2} I_{m-1/2,p}) = \\ & \dots \kappa I_{CNp} \Delta V - K I_{m,p} \Delta V + \frac{\sigma_s \Delta V}{4\pi} \sum_{m'} \Phi_{m'm} w_{m'} I_{m'p} \end{aligned} \quad (5.21)$$

onde A_n, A_s, A_l e A_o representam as áreas dos lados de um volume de controle para as faces norte, sul, leste e oeste, respectivamente, ΔV é o volume do elemento de controle, e p é o

ponto de interesse para o qual calcula-se a intensidade I_{mp} . Os termos I_{mn} , I_{ms} , I_{ml} e I_{mo} representam as intensidades para a direção individual m para os volumes norte, sul, leste e oeste, respectivamente. O termo $I_{m-1/2,p}$ é a intensidade no ponto de interesse na direção angular $m-1/2$, onde a direção $m\pm 1/2$ define os limites da faixa angular da quadratura numérica w_m . O termo $(\alpha_{m+1/2}I_{m+1/2,p} - \alpha_{m-1/2}I_{m-1/2,p})$ aparece em virtude da utilização da técnica de diferenciação de Carlson e Lathrop, 1968, para o termo com derivada angular, $\partial/\partial\varphi$, na Eq. (5.20), e representa o fluxo de energia para fora e para dentro da faixa angular, onde o termo α é dado por $\alpha_{m+1/2} = \alpha_{m-1/2} - w_m\mu_m$, sendo o primeiro $\alpha_{m-1/2}$ nulo em cada nível ξ .

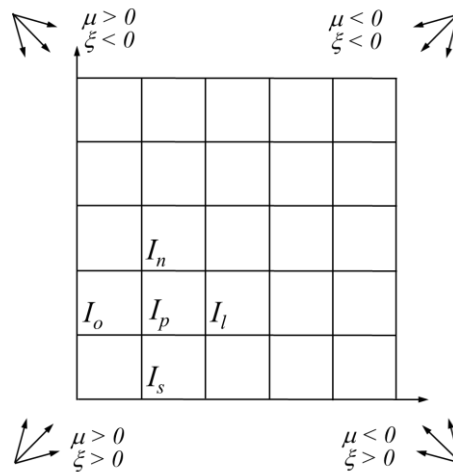


Figura 5.3 - Volume de controle e cossenos diretores para os cálculos DOM

[Centeno, 2014].

Para uma direção m que possua cossenos diretores positivos ($\mu_m > 0$, $\xi_m > 0$), eliminam-se as intensidades nos pontos desconhecidos I_{mn} , I_{ml} e $I_{m+1/2,p}$ expressando-as em termos de intensidades em pontos conhecidos I_{ms} , I_{mo} e $I_{m-1/2,p}$, através de

$$\begin{aligned}
 I_{mp} &= \zeta I_{mn} + (1 - \zeta) I_{ms} \\
 I_{mp} &= \zeta I_{ml} + (1 - \zeta) I_{mo} \\
 I_{mp} &= \zeta I_{m+1/2,p} + (1 - \zeta) I_{m-1/2,p}
 \end{aligned}
 \tag{5.22}$$

onde ζ é um fator de interpolação ($\zeta = 0,5$ na presente pesquisa). Estas relações de interpolação são utilizadas para expressar valores de intensidade em pontos desconhecidos por valores de intensidade em pontos conhecidos e conseguir resolver a Eq. (5.21) para I_{mp} .

Substituindo a Eq. (5.22) na Eq. (5.21) e rearranjando os termos, obtém-se uma equação para I_{mp} em função de variáveis conhecidas

$$I_{mp} = \frac{(\mu_m A_r I_{ms} + \xi_m A_z I_{mo} - [(A_n - A_s)/w_m] A_\alpha I_{m-1/2,p} + \zeta S \Delta V)}{(\mu_m A_n + \xi_m A_l - [(A_n - A_s)/w_m] \alpha_{m+1/2} + K \zeta \Delta V)} \quad (5.23)$$

para $\mu_m > 0$, $\xi_m > 0$, onde

$$\begin{aligned} A_r &= A_s \zeta + (1 - \zeta) A_n \\ A_z &= A_w \zeta + (1 - \zeta) A_e \\ A_\alpha &= \alpha_{m-1/2} \zeta + (1 - \zeta) \alpha_{m+1/2} \\ S &= \kappa I_{CNp} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \sum_{m'} \Phi_{m'm} w_{m'} I_{m'p} \end{aligned}$$

As demais intensidades I_{mn} , I_{ml} e $I_{p,m+1/2}$ podem ser encontradas utilizando as relações de interpolação, conforme Eq. (5.22). Os valores das intensidades encontradas serão utilizados como dados de entrada para o cálculo da intensidade para a próxima célula na direção correspondente, e a solução prossegue sucessivamente através de toda a malha para esta direção.

Na aproximação S_6 , são calculadas para cada uma das vinte de quatro direções consideradas as intensidades de todos os pontos no domínio computacional. A forma detalhada da aplicação do método, conforme utilizado no presente trabalho pode ser encontrada em Centeno, 2014. Mais detalhes sobre o método DOM podem ser encontrados em Kaplan et al., 1994; Menart, 2000; e Modest, 2003.

Como métodos alternativos para a solução da RTE, tem-se na literatura o método de harmônicas esféricas (também conhecido como Aproximações P-N), o método das Zonas, o método de Transferência Discreta de Radiação e o método de Monte Carlo.

5.3 Independência de malha

O presente trabalho utiliza a malha indicada por Centeno, 2014, conforme apresentado na Fig. 5.4. O estudo de convergência de malha realizado teve como objetivo verificar a discretização necessária do domínio físico para obter resultados numéricos suficientemente independentes do grau de refinamento da malha.

A definição da malha foi realizada utilizando o modelo WSGG e admitindo cálculos acoplados entre escoamento, combustão e radiação, evidenciando assim a similaridade com as condições de simulação da presente pesquisa.

O estudo levou em consideração três malhas distintas, 48×140 (malha 1), 24×70 (malha 2) e 12×35 (malha 3), calculando a fração radiativa, temperatura máxima e frações molares máximas de CO₂ e H₂O para cada uma das malhas. Empregou-se a metodologia de análise de convergência de malha proposta inicialmente por Roache, 1994, e atualizada em Celik et al., 2008.

Chegou-se aos índices de convergência de malha (GCI – do inglês: *Grid Convergence Index*) apresentados na Tab. 5.3, onde a convergência da solução para a faixa assintótica pode ser obtida através de

$$\chi = \frac{GCI_{23}}{r^p GCI_{12}} \quad (5.24)$$

o qual, resultando próximo de um, indica que as soluções estão dentro da faixa assintótica de convergência.

Tabela 5.3 - Índice de convergência de malha para as variáveis: fração radiativa, temperatura máxima e frações molares máximas de CO₂ e H₂O [Centeno, 2014].

	f_{rad}	T_{max}	$x_{CO_2,max}$	$x_{H_2O,max}$
GCI ₁₂ [%]	$5,7 \times 10^{-2}$	$3,0 \times 10^{-1}$	$4,1 \times 10^{-2}$	$7,2 \times 10^{-2}$
GCI ₂₃ [%]	$1,5 \times 10^{-1}$	$1,1 \times 10^0$	$1,1 \times 10^0$	$5,2 \times 10^{-1}$
χ	1,00072	1,00658	1,00860	0,99643

Considerou-se, então, que a malha 1 (48×140 volumes) seja apropriada para ser utilizada. A malha é uniformemente espaçada em ambas as direções r e z , sendo mais refinada somente na região próxima da sua parede periférica, para capturar efeitos da camada limite. O motivo de se utilizar a malha uniformemente espaçada em ambas as direções deve-se ao fato de que os gradientes de temperatura e de concentrações de espécies químicas no interior da câmara de combustão apresentam expressivas variações em todo o domínio.



Figura 5.4 - Malha com 48×140 volumes utilizada nos cálculos [adaptado de Centeno, 2014].

As simulações foram realizadas em um computador *desktop* com processador AMD FX-8150 Eight-Core 3,6 GHz e 16,0 GB de memória. Os custos computacionais, em termos de segundos de CPU por iteração, para os três níveis de refinamento de malha estudados foram 0,115, 0,352, e 1,036, respectivamente. Para a malha adotada no presente estudo, malha 1, são necessárias aproximadamente 70000 iterações para obter a solução convergida, resultando então em um tempo total de aproximadamente 76 horas, considerado aceitável para os propósitos do estudo.

As soluções foram consideradas convergidas quando o somatório dos resíduos normalizados no método SIMPLE foram inferiores a 10^{-8} , e a variação relativa máxima entre iterações para as demais equações era inferior a 10^{-6} .

5.4 Avaliação do modelamento com base no balanço de energia

O cálculo do balanço de energia na câmara de combustão foi realizado para a verificação do código utilizado na pesquisa. Os cálculos foram realizados considerando os

efeitos da transferência de calor por radiação na câmara, conforme Tab. 5.4.

Tabela 5.4 - Análise do balanço de energia na câmara de combustão.

Entrada [kW]		Saída [kW]	
E1. Combustível	8,9	S1. Comb. não queimado	22,1
E2. Ar	65,1	S2. Gases de exaustão	433,9
E3. Ent. de combustão	561,6	S3. Paredes	168,5
Total	635,6	Total	624,5

onde:

E1: Energia referente ao fluxo de combustível na entrada da câmara, obtida com a entalpia do combustível na temperatura de 313,15 K.

E2: Energia referente ao fluxo de ar na entrada da câmara, obtida com a entalpia do ar na temperatura de 323,15 K.

E3: Energia referente à entalpia de combustão, avaliada na temperatura de entrada do combustível, 313,15 K.

S1: Energia existente na saída da câmara referente ao combustível que não reagiu.

S2: Energia existente na saída da câmara referente ao fluxo de gases quentes.

S3: Energia que chega às paredes da câmara (convecção e radiação) para ser transferida ao exterior.

Foi encontrada uma diferença de aproximadamente 1,7% entre a quantidade de energia que entra na câmara e a que sai. A diferença é considerada aceitável e é resultante de alguns fatores, como por exemplo: critério de convergência considerado, aproximações numéricas impostas, e cálculo da transferência de calor pelas paredes. O balanço global de massa na câmara ficou com diferença relativa da ordem de 10^{-6} entre as vazões mássicas que entram (ar e combustível) e as que saem da câmara (combustível residual e produtos). Para todas as simulações o balanço de energia foi verificado, atingindo diferenças muito próximas de 1,7% entre a quantidade de energia que entra e a que sai da câmara de combustão.

6 RESULTADOS

6.1 Injeção de fuligem junto ao ar de combustão

Considerando uma câmara real, uma forma possível de se injetar fuligem externa é junto ao ar de entrada, no bocal do queimador. A fuligem pode ser arrastada pelo ar que escoar no interior de tubos, a partir de um alimentador até o interior da câmara de combustão.

De forma semelhante, também considerando a injeção de fuligem próximo ao bocal de entrada da câmara, Pourhoseini et al., 2013, realizou simulações experimentais e numéricas em sua pesquisa. Porém, o presente trabalho possui maior interesse no efeito que a injeção externa possui em relação ao comportamento das propriedades radiantes do meio participante, ao contrário do autor citado, que buscava averiguar as alterações nas reações químicas do processo.

Como pode ser visto ao se analisar as equações de formação e oxidação da fuligem (Cap. 2.6), o cálculo está desacoplado da cinética química geral do problema de combustão. Essa modelagem foi utilizada por diversos autores citados na bibliografia, obtendo bons resultados para suas simulações, porém sempre considerando a fuligem que é formada naturalmente pelas chamas e posteriormente oxidada, em pequenas frações volumétricas em ordens de 10^{-7} à 10^{-4} . Contudo, quando o modelo é utilizado em sua forma original no problema da injeção externa de fuligem, toda a fuligem injetada junto ao ar da queima é oxidada muito rapidamente, ainda na região fria da câmara, o que não representa de forma realista o que acontece na prática.

Em Reddy et al., 2015, é possível verificar que a taxa de oxidação de fuligem está concentrada nas regiões com temperaturas elevadas da câmara, acima de 1000 K. Com a finalidade de formar campos com fração volumétrica de fuligem mais próximos ao que se ocorre em câmaras reais, foram realizados ajustes na formulação de oxidação de fuligem do presente trabalho, fazendo com que a oxidação aconteça apenas nas regiões da câmara com maiores temperaturas.

A Fig. 6.1 apresenta os campos de fração volumétrica de fuligem gerados para diferentes situações. Na Fig. 6.1 (a) pode-se verificar o campo de concentração da fuligem quando apenas a formação e a oxidação natural de fuligem na queima de metano são consideradas. Esse caso já foi estudado por Centeno, 2014. Considerando-se o fluxo de calor radiativo sobre a parede radial da câmara na região da fuligem, houve um aumento de 25%

em relação à simulação que despreza a presença de fuligem no interior da câmara.

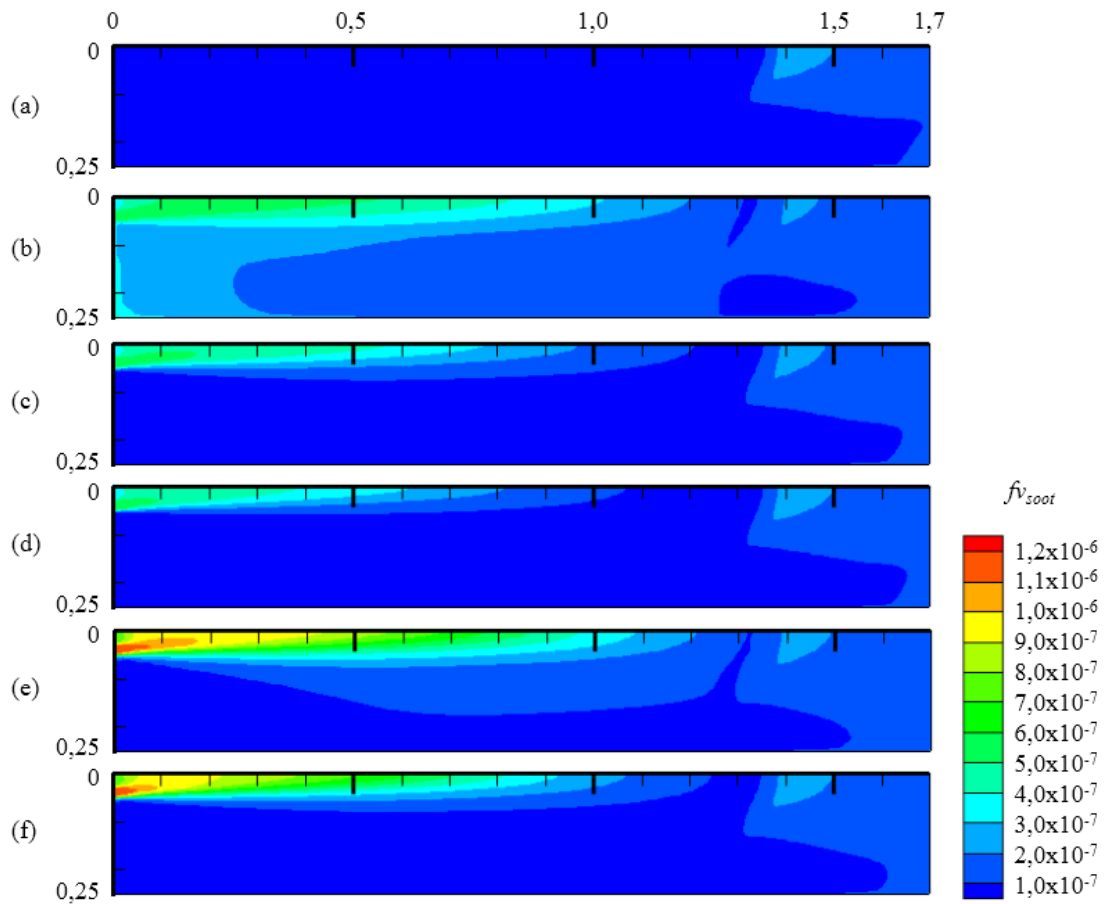


Figura 6.1 - Campos de frações volumétricas de fuligem considerando: (a) formação e oxidação natural da fuligem, sem injeção externa; (b) injeção da fração mássica de 1×10^{-3} de fuligem (equivalente à 6×10^{-7} em fração volumétrica), desconsiderando a sua oxidação para $T < 1000$ K; (c) injeção da fração mássica de 1×10^{-3} de fuligem e $FM = 2\%$ para $T < 1000$ K; (d) injeção da fração mássica de 1×10^{-3} de fuligem e $FM = 5\%$ para $T < 1000$ K; (e) injeção da fração mássica de 2×10^{-3} de fuligem (equivalente à $1,2 \times 10^{-6}$ em fração volumétrica) e $FM = 2\%$ para $T < 1000$ K; (f) injeção da fração mássica de 2×10^{-3} de fuligem e $FM = 5\%$ para $T < 1000$ K.

Na Fig. 6.1 (b) é apresentado o campo de fração volumétrica de fuligem que foi gerado a partir da injeção de uma fração mássica de 1×10^{-3} . Além da injeção externa junto à entrada de ar para queima, foi desprezada a oxidação da fuligem nas regiões mais frias da câmara (abaixo de 1000 K).

Nos demais campos da Fig. 6.1, (c), (d), (e) e (f), são injetadas diferentes quantidades de fuligem e, para o fenômeno da oxidação da fuligem nas regiões mais frias, é aplicado um fator multiplicador (FM) na Eq. (2.31) que faz com que a modelagem da oxidação da fuligem seja aplicada de forma parcial nas regiões com temperatura abaixo de 1000 K, voltando a ser total na região mais quente da câmara. Tanto a quantidade de fuligem injetada quanto o fator multiplicador para a oxidação de cada campo são indicados na legenda da Fig. 6.1. Dois fatores multiplicadores foram considerados, de 2% e 5%. Ressalta-se que esses valores não foram obtidos a partir de uma análise detalhada da cinética de combustão da fuligem, mas de forma a gerar campos de concentração de fuligem que sejam condizentes com o que se poderia esperar na injeção de fuligem em uma câmara de combustão. Embora uma aproximação ao problema real, o campo de fuligem permitirá uma análise do aumento na transferência radiativa, que é o principal objeto desse estudo. Estudos futuros poderão reavaliar o uso desses fatores de multiplicação.

É possível verificar que o perfil evidenciado ao lado direito do campo da Fig. 6.1 (a) se repete nos demais campos. Ele representa a fração volumétrica de fuligem que é formada naturalmente pela combustão do metano. Nos demais campos, (b), (c), (d), (e) e (f), notam-se alterações na região próxima ao bocal de entrada de ar e na região central da câmara, de acordo com as proporções de fuligem que foram injetadas e com as considerações realizadas em relação ao fator de multiplicação da oxidação.

A quantidade de fuligem injetada em fração mássica foi escolhida de modo a alcançar as mesmas proporções da fuligem formada naturalmente pela combustão do metano, na ordem de 10^{-7} em frações volumétricas. É esperado que a injeção de fuligem nestas proporções não interfira significativamente na cinética química da queima de metano, pois a fuligem injetada exige apenas em torno de 1,1% do oxigênio disponível no ar de entrada.

A injeção considerada de 1×10^{-3} em fração mássica, corresponde a 0,77 kg por hora, de acordo com as condições físicas do problema. Enquanto que a injeção de uma fração mássica de 2×10^{-3} , corresponde à 1,54 kg de fuligem sendo injetada a cada hora no interior da câmara. Essas quantidades de massa são consideradas viáveis de serem trabalhadas, quando consideram-se os transportes com característica de arraste por ar. O presente trabalho não se deteve no dimensionamento de tais equipamentos, contudo, é comum encontrar no mercado soluções envolvendo ventiladores com alta pressão, e baixa vazão, com capacidades aproximadas de 100 kg/h de arraste de partículas. Considerando a utilização de um desses ventiladores, o controle da quantidade injetada poderia ser realizado através do ajuste da

abertura bocal entre o cone alimentador da fuligem e a tubulação de ar que parte do ventilador e vai até o bocal do queimador da câmara de combustão.

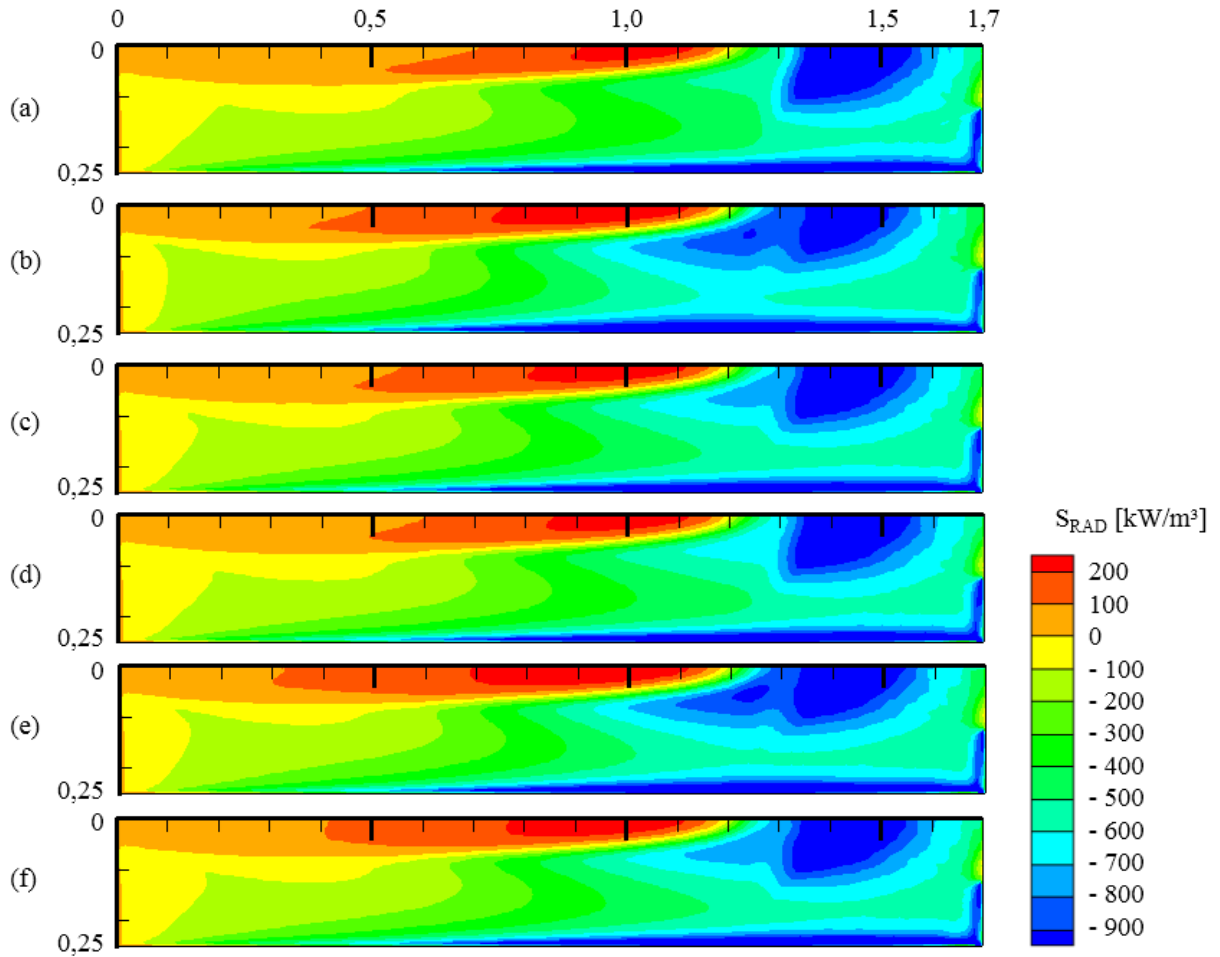


Figura 6.2 - Campos de termo fonte de calor radiante considerando: (a) formação e oxidação natural da fuligem, sem injeção externa; (b) injeção da fração mássica de 1×10^{-3} de fuligem, desconsiderando a sua oxidação para $T < 1000$ K; (c) injeção da fração mássica de 1×10^{-3} de fuligem e $FM = 2\%$ para $T < 1000$ K; (d) injeção da fração mássica de 1×10^{-3} de fuligem e $FM = 5\%$ para $T < 1000$ K; (e) injeção da fração mássica de 2×10^{-3} de fuligem e $FM = 2\%$ para $T < 1000$ K; (f) injeção da fração mássica de 2×10^{-3} de fuligem e $FM = 5\%$ para $T < 1000$ K.

Avaliando-se o campo da Fig. 6.1 (b), é possível verificar que as proporções de fuligem ficaram com uma distribuição diferente do que se espera na prática. Uma vez que a oxidação foi completamente desprezada para a região fria, abaixo de 1000 K, a fuligem

seguiu o caminho do escoamento e devido às recirculações próximas aos cantos da câmara, acabou se acumulando em proporções consideráveis nas regiões próximas ao bocal de entrada. Este campo será mantido e também avaliado no início do presente capítulo. Com finalidade investigativa, ele irá auxiliar na percepção e avaliação de alguns conceitos associados à transferência radiativa.

Na Fig. 6.2 são mostrados os campos do termo fonte de calor radiante para os mesmos casos apresentados anteriormente.

Nos campos de termo fonte de calor radiante, conforme a Fig. 6.2, a região da chama com as temperaturas mais elevadas emite mais radiação do que absorve, conduzindo a um termo fonte de calor radiante negativo, enquanto a região da chama com as temperaturas mais baixas absorve mais radiação do que emite, o que leva a um termo fonte de calor radiativo positivo. Em todos os casos em que se considerou a injeção de fuligem houve um aumento do termo fonte em termos absolutos. Isso indica que a partir da energia química disponível, uma parcela maior passou a ser convertida em transferência radiativa. Para os casos estudados na presente pesquisa, a taxa líquida de transferência radiativa e a fração radiativa foram calculadas e os resultados são apresentados na Tabela 6.1.

Tabela 6.1 - Taxa líquida de transferência radiativa e da fração radiativa.

Campo de fuligem	Taxa radiativa líquida [kW/rad]	f_{rad} [%]
(a) Natural (sem injeção externa)	132,3	22,0%
(b) Inj. de 1×10^{-3} ; sem oxid. p/ T <1000 K.	152,8	25,4%
(c) Inj. de 1×10^{-3} ; 2% de oxid. p/ T <1000 K.	140,9	23,4%
(d) Inj. de 1×10^{-3} ; 5% de oxid. p/ T <1000 K.	136,7	22,7%
(e) Inj. de 2×10^{-3} ; 2% de oxid. p/ T <1000 K.	149,0	24,8%
(f) Inj. de 2×10^{-3} ; 5% de oxid. p/ T <1000 K.	140,8	24,4%

Ao comparar o caso (e) com o caso (a), pode-se observar a partir da Tabela 6.1 que a injeção de fuligem aumentou a fração radiativa em 12,8% (de 22,0% para 24,8%). De acordo com Mehta, 2008, para uma chama turbulenta de metano com características semelhantes, porém sem considerar injeção externa, as contribuições dos gases e da fuligem para a transferência radiativa correspondem à aproximadamente 90% e 10% do total da radiação, respectivamente. Aumentando a quantidade de fuligem, é esperado que sua proporção na

transferência radiativa também aumente, a exemplo do que acontece nas chamas de outros combustíveis que produzem mais fuligem, como: o propano, o etileno e o acetileno, nos quais a participação da fuligem para a transferência radiativa é dominante.

A partir do aumento do termo fonte de calor radiante, também é esperado que o fluxo de calor transmitido às paredes da câmara aumente. Na Fig. 6.3 são apresentadas as curvas para os casos estudados.

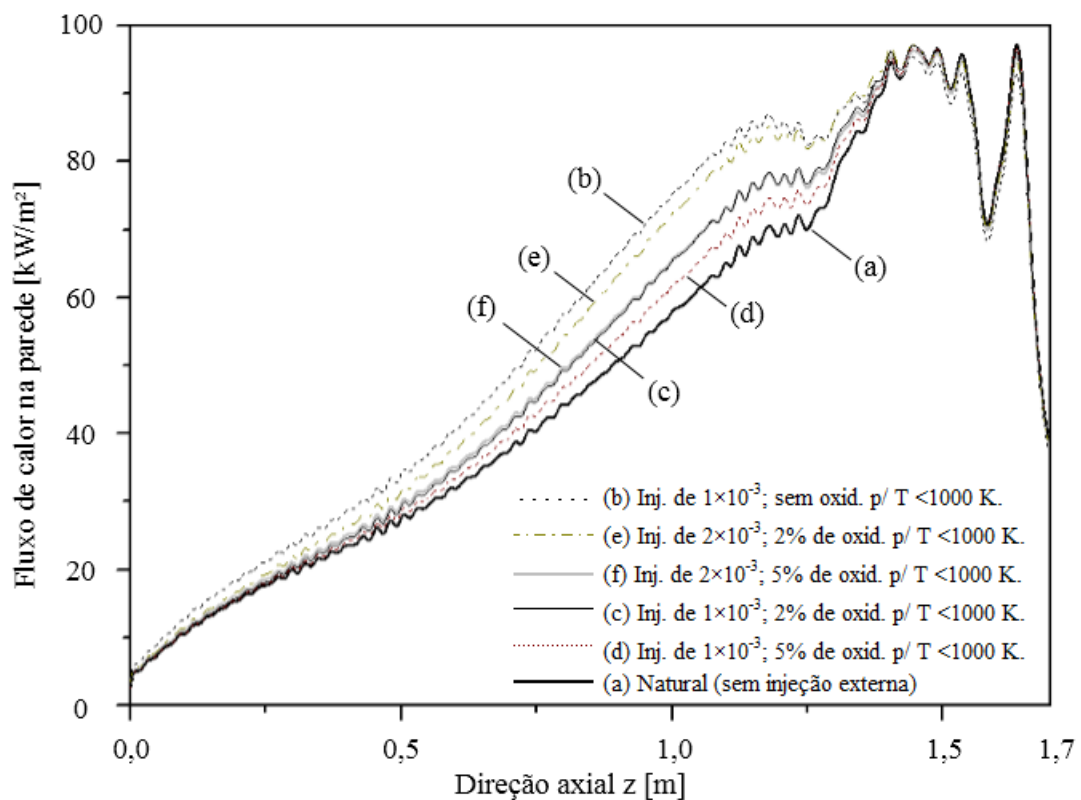


Figura 6.3 - Fluxo de calor radiativo sobre a parede radial da câmara de combustão.

Também em todos os casos em que se considerou a injeção de fuligem, houve o aumento do fluxo de calor radiante trocado com as paredes. Este aumento está ligado à eficiência da câmara, de acordo com sua aplicação prática. Na Tabela 6.2 é possível verificar a porcentagem média de aumento de cada caso testado em relação à simulação que não considera a injeção externa de fuligem. A tabela relaciona os diferentes casos e a porcentagem de diferença para uma determinada região, iniciando em $z = 0,3$ m até $z = 1,2$ m. Na região de $z = 1,2$ m até o final da câmara, pode ser verificado na Fig. 6.3 que a troca de calor em todos os campos possui o mesmo comportamento do caso (a), mostrando que nesta região o fenômeno é fortemente influenciado pela formação e oxidação natural da fuligem na queima

do metano.

Como esperado, no caso (b), onde a oxidação da fuligem é totalmente negligenciada para baixas temperaturas, o fluxo de calor transmitido às paredes foi superior aos demais casos, ficando 25,8% maior do que o caso considerado padrão para comparações (a), que considera apenas a formação natural de fuligem da chama.

Tabela 6.2 - Porcentagem média de aumento no fluxo transmitido às paredes de $0,3 \text{ m} < z < 1,2 \text{ m}$, para diferentes quantidades de fração mássica de fuligem injetadas e diferentes considerações do modelo de oxidação.

Campo de fuligem	%
(a) Natural (sem injeção externa)	padrão
(b) Inj. de 1×10^{-3} ; sem oxid. p/ $T < 1000 \text{ K}$.	25,8%
(c) Inj. de 1×10^{-3} ; 2% de oxid. p/ $T < 1000 \text{ K}$.	11,7%
(d) Inj. de 1×10^{-3} ; 5% de oxid. p/ $T < 1000 \text{ K}$.	6,3%
(e) Inj. de 2×10^{-3} ; 2% de oxid. p/ $T < 1000 \text{ K}$.	21,5%
(f) Inj. de 2×10^{-3} ; 5% de oxid. p/ $T < 1000 \text{ K}$.	12,1%

Para os demais casos, também houve um aumento significativo no fluxo de calor nas paredes desta região, sendo que o mais expressivo foi o caso (e), o qual considera a injeção de uma quantidade maior de fuligem (2×10^{-3} em fração mássica) e aplica um multiplicador de 2% na oxidação em regiões frias. Em todos os casos considerados, este é o que conduz a um campo global com a maior concentração de fuligem na câmara.

Uma importante constatação pode ser feita quando comparados os casos (c) e (f). O campo (f) possui o dobro da quantidade de fuligem injetada em (c), porém a quantidade de calor trocado por radiação com as paredes é praticamente a mesma. O que pode ser visto também na Figura 6.3, a qual apresenta as duas curvas praticamente sobrepostas em diversos pontos. Após as considerações aplicadas na oxidação da fuligem, pode-se observar que os campos de fração volumétrica apresentados na Figura 6.1 em (c) e (f), ficaram com uma distribuição muito similar na região quente da câmara. Ou seja, é evidenciado que a presença da fuligem em maior proporção na parte fria da câmara não acarreta de maneira significativa no fluxo de calor trocado, enquanto que a proporção de fuligem na parte quente interfere de maneira expressiva. Deve-se considerar que a presença de fuligem na região mais fria da

câmara resulta em maior absorção de radiação das regiões mais quentes do gás, ao invés do calor ser transferido diretamente à parede da câmara.

A influência mais severa em regiões quentes está de acordo com o esperado, considerando o modelo WSGG. Segundo o modelamento da radiação da fuligem utilizado na presente pesquisa, a aplicação dos coeficientes sugeridos por Cassol, 2013, sofrem grande influência da temperatura quando inseridos na Eq. (3.44).

Em relação aos campos de temperaturas, não houve grande variação quanto ao perfil apresentado entre os casos estudados. Na Fig. 6.4 são apresentados os campos de temperatura para os casos (a) e (e). Avaliando-os, é possível verificar que apenas houve alteração no que tange às temperaturas máximas alcançadas. Os demais casos estudados ficaram em níveis intermediários, apresentando comportamento semelhante.

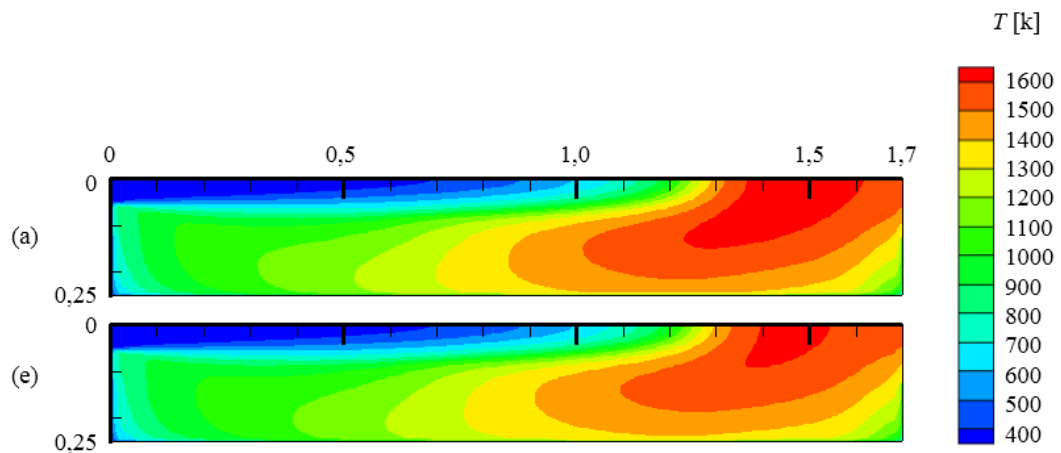


Figura 6.4 - Campos de temperatura considerando: (a) formação e oxidação natural da fuligem, sem injeção externa; (e) injeção da fração mássica de 2×10^{-3} de fuligem e $FM = 2\%$ para $T < 1000$ K.

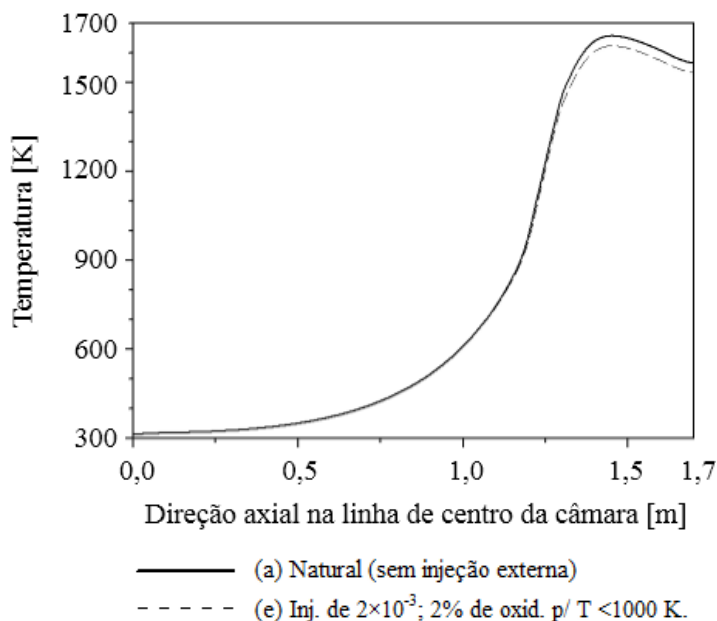


Figura 6.5 - Perfil de temperatura ao longo da direção axial.

Quando é realizada a injeção de fuligem de acordo com o caso (e), verifica-se que a temperatura máxima no interior da câmara diminui de 1658,9 K para 1623,7 K, se comparada ao caso sem injeção externa (a). A Fig. 6.5 apresenta a comparação das temperaturas ao longo da linha de centro para os dois casos citados. Essa diminuição demonstra concordância com o que foi reportado na avaliação de Pourhoseini et al., 2013. Em sua pesquisa, os autores encontraram uma diferença de 211 K, porém considerando uma injeção de fuligem na ordem de $1,2 \times 10^{-2}$, seis vezes maior que o caso (e). Mesmo uma diferença relativamente pequena, como a de 35,2 K encontrada, pode contribuir para o aumento da vida útil da câmara de combustão, além de representar que mais calor está sendo transferido para as paredes. Centeno, 2014, também encontrou uma diferença na temperatura máxima, diminuindo em 15 K, quando comparou a simulação que considera a formação da fuligem com os resultados da simulação que ignora totalmente a presença das partículas, concordando com os resultados de Mehta, 2008.

Além do perfil de temperatura para os dois casos citados, (a) e (e), o perfil da fração volumétrica de fuligem na linha de centro da câmara também é apresentado na Fig. 6.6 para fins de comparação.

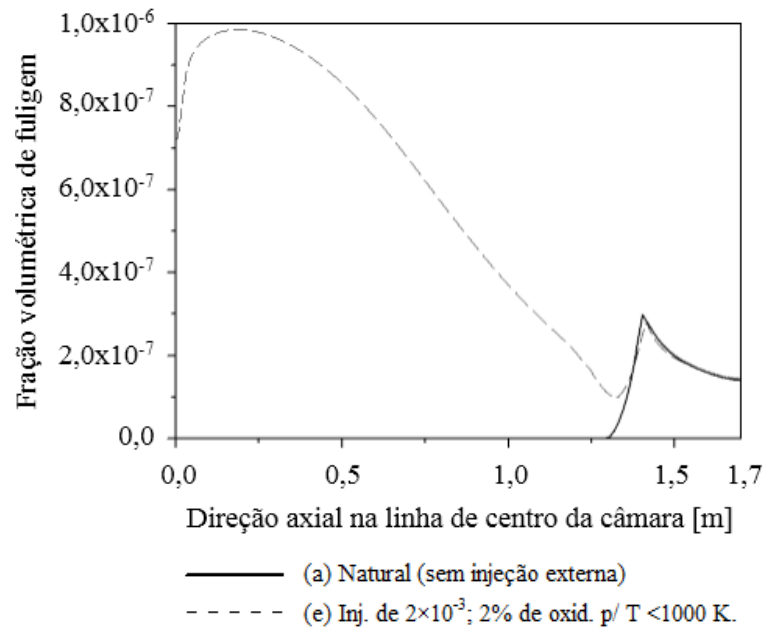


Figura 6.6 - Perfil de fração volumétrica de fuligem ao longo da direção axial.

Percebe-se que logo no início há um aumento abrupto da concentração de fuligem na linha de centro, quando há injeção de fuligem no interior da câmara. Isso acontece devido à injeção acontecer a partir do anel que circunda a linha central, juntamente com o ar da queima. Após, a fração volumétrica diminui pelo efeito da distribuição das partículas pela câmara e também devido à oxidação. Este comportamento acontece até aproximadamente $z = 1,3$ m, nesta altura da câmara, as condições para a formação da fuligem natural são supridas, o que faz com que ambos processos tenham um comportamento semelhante até o final da câmara. A Fig. 6.6 possui grande importância por que revela que ao se adicionar fuligem externa ao problema nas frações e condições descritas, não há um aumento na concentração de fuligem que é perdida ao meio ambiente. É importante ressaltar que as condições iniciais do problema impõem que a câmara opere com uma quantidade de oxigênio abaixo do que é necessário para criar uma reação estequiométrica. Não é esperado que a injeção de fuligem interfira de maneira significativa na cinética química, pois, considerando as vazões mássicas do problema e uma reação química de que cada átomo de carbono da fuligem consumiria dois átomos de oxigênio em sua oxidação, formando dióxido de carbono, calcula-se que a fuligem injetada consumiria de 1,1% a 2,2% do oxigênio da câmara, de acordo com a fração mássica considerada na injeção (1×10^{-3} ou 2×10^{-3} , respectivamente). Ou seja, assumindo-se que a proporção ar-combustível possa ser alterada, um pequeno aumento na vazão de ar para a

queima já equalizaria o problema.

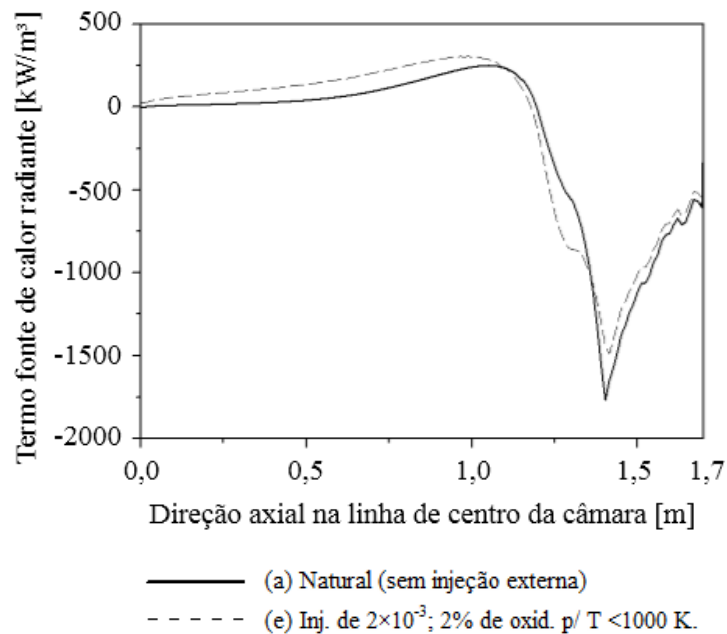


Figura. 6.7 - Perfil do termo fonte de calor radiante ao longo da direção axial.

Seguindo na comparação entre os dois casos específicos (a) e (e), a Figura 6.7 apresenta o comportamento do termo fonte de calor radiante na linha de centro da câmara. Por definição, o termo fonte representa um balanço, conforme já explicado a partir da Figura 6.2, quando os valores são positivos, a região está absorvendo calor do meio e quando os valores são negativos, há a emissão de calor radiante para as demais regiões. Ao se injetar fuligem, nota-se que o termo fonte de calor radiante possui valores maiores, com sinal positivo, até uma altura de aproximadamente $z = 1,2$ m, indicando que está recebendo mais calor do meio na linha central da câmara do que o caso em que não há a injeção de fuligem externa. A partir do ponto citado, o sinal do termo fonte muda, ou seja, começa a emitir calor para o restante do domínio. Comparando-se os dois casos, é possível verificar que quando se injeta fuligem, o termo fonte possui valores menores, em módulo, do que o caso em que não há injeção externa. Possivelmente, nestes locais, a maior concentração de fuligem no entorno faz com que se receba mais energia na linha de centro, tornando o balanço menos negativo. Lembrando que o termo fonte é um fator local, avaliando todo o campo da câmara, percebe-se que o termo fonte de calor radiante total aumentou seus níveis de emissão de calor.

Além da abordagem realizada através da temperatura e do FM , outras duas formas de

cálculo, considerando o número de Damköler (Da), são possíveis para criar o campo de distribuição de fuligem no interior da câmara. Uma, ativando o mecanismo de oxidação apenas com $Da > 1$, e outra, multiplicando a taxa de oxidação por Da , quando $Da < 1$. É esperado que a distribuição de fuligem fique próxima aos demais campos obtidos no presente trabalho, neste caso, o calor transmitido para as paredes deve ficar em patamares semelhantes.

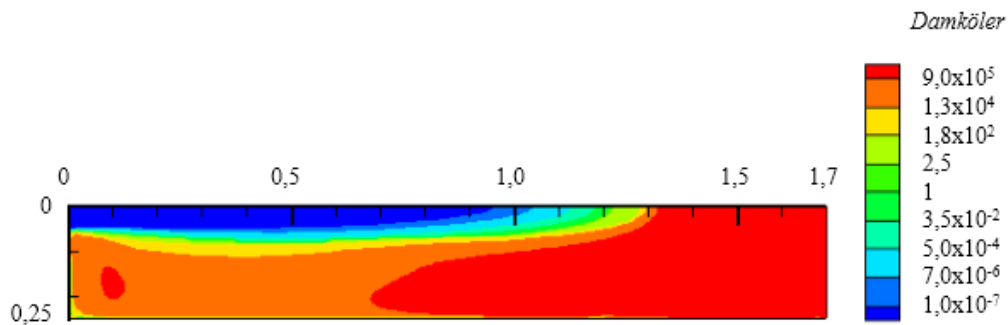


Figura. 6.8 – Distribuição do número de Damköler.

6.2 Avaliação da influência da fuligem na região final da câmara

Como pode ser visto a partir da avaliação da Fig. 6.3, o impacto da fuligem na região com altas temperaturas é maior no que se refere ao fluxo de calor transferido às paredes da câmara, ao ser comparado com o seu impacto nas regiões com temperaturas baixas. Com o intuito acadêmico de aprofundar os estudos nesta região da câmara, foram gerados novos campos de distribuição de fuligem para avaliar seu impacto no termo fonte de calor radiante e no fluxo de calor nas paredes.

Para esta simulação, o campo de fuligem formado naturalmente na combustão do metano (representado pelo campo (a) da Fig. 6.1) foi duplicado em uma das avaliações e multiplicado por cinco na outra. Utilizando campos convergidos de temperatura, frações molares de H_2O e de CO_2 e a fração volumétrica de fuligem, após as alterações citadas, rodou-se o algoritmo de radiação de maneira desacoplada, apenas para estudar os resultados de maneira qualitativa. Nesta simulação, não são consideradas as interações turbulência-radiação e não são resolvidas as equações que envolvem as reações químicas. Apenas utilizando os campos já citados, que foram inicialmente gerados a partir do cálculo acoplado sem considerar a injeção de fuligem, são aplicadas as equações para a solução da radiação térmica em meios participantes.

A escolha por multiplicar o campo natural partiu da observação do campo (a) da Figura 6.1, que apresenta uma distribuição de fuligem justamente na região de alta temperatura, conforme pode ser visto na Figura 6.4.

Observa-se na Figura 6.9 a influência considerável que a fuligem exerce na região de alta temperatura, uma vez que ao duplicar o campo de fuligem, em média aumenta-se em 14,5% o fluxo de calor transmitido às paredes na região específica. Ao aumentar a fração volumétrica de fuligem em cinco vezes, se alcança um aumento médio de 99,2% na mesma região, ou seja, o calor que é transmitido às paredes da câmara praticamente dobra a partir de $z = 1,25$ m até o final da câmara.

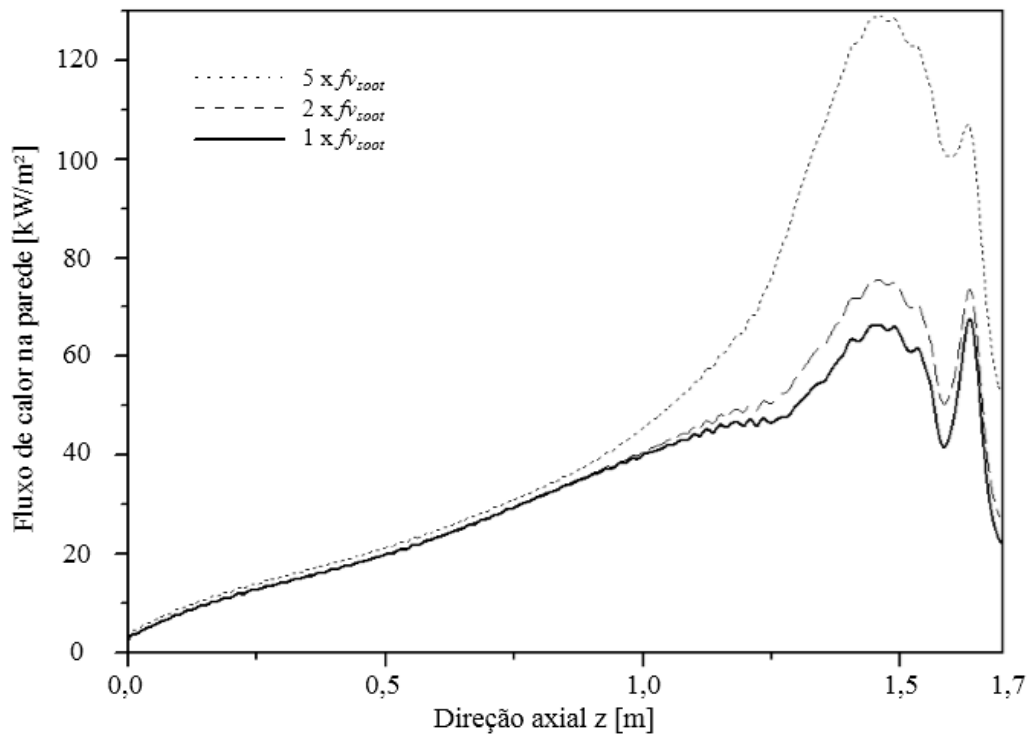


Fig. 6.9 - Fluxo de calor radiativo sobre a parede radial da câmara de combustão.

Entende-se que esta é uma condição especial de aplicação; uma das possibilidades para se chegar a uma situação similar, seria considerar a injeção de fuligem na linha central da câmara a uma altura de aproximadamente $z = 1,2$ m, conforme indicado na Fig. 6.10. Na prática, a injeção de fuligem numa região com temperaturas mais altas é possível de ser realizada, a forma construtiva dos equipamentos envolvidos nessa injeção deve considerar materiais adequados para temperaturas extremas, principalmente no que tange o

desenvolvimento da tubulação para a injeção de fuligem na linha de centro da câmara. Os estudos para essa nova injeção devem respeitar a forma como a fuligem é inserida no volume de controle, se for um transporte pneumático, por exemplo, deve ser considerado o ar que está entrando em conjunto com a fuligem, as temperaturas tanto do ar quanto da fuligem, o tempo que as partículas de fuligem levam para aumentar sua temperatura e também a posição ótima para que esse aquecimento possa acontecer, antes de alcançar a região de maior temperatura da câmara. Levando-se em consideração que o tamanho das partículas varia de $0,005 \mu\text{m}$ à $0,08 \mu\text{m}$, é esperado que o tempo para aquecimento das partículas seja mínimo, de acordo com as propriedades da fuligem, que podem variar a partir da composição química e a porosidade das partículas [Modest, 2003].

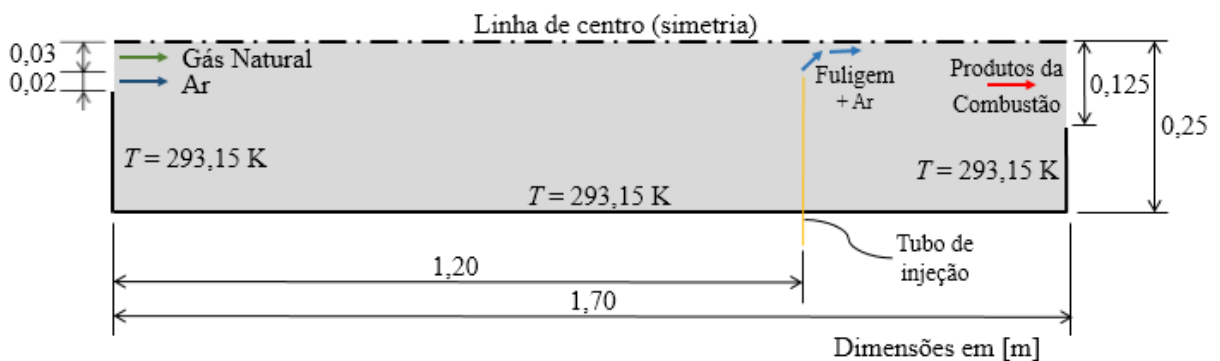


Figura 6.10 – Sugestão esquemática que representa uma das possibilidades de se injetar fuligem na região quente da câmara de combustão.

De modo ilustrativo, a Figura 6.10 exemplifica uma das possibilidades a ser exploradas para aumentar a concentração de fuligem na região da câmara com maiores temperaturas, através da injeção local. Outra maneira de se verificar um aumento na concentração de fuligem na região de altas temperaturas da câmara de combustão seria trocar o combustível por propano, etileno ou acetileno, os quais produzem mais fuligem que o metano durante a combustão, ou mesmo aplicar uma mistura de metano com um destes outros combustíveis. Ainda como sugestão, pode-se aplicar um destes combustíveis alternativos diretamente na região de altas temperaturas.

7 CONCLUSÕES

O presente trabalho simulou numericamente a injeção de fuligem em chamas turbulentas de metano e ar não pré-misturados em uma câmara cilíndrica, visando estudar sua influência na radiação térmica. A câmara de combustão utilizada segue as características da câmara descrita por Garréton e Simonin, 1994.

A proposta de injetar fuligem partiu de uma análise mais detalhada da combustão, na qual é verificada a importância da formação e da oxidação da fuligem na manutenção da chama e no aumento da transferência de calor radiativo na câmara cilíndrica. No intuito de averiguar possíveis aumentos no calor transportado para as paredes da câmara, o que significa um aumento de sua eficiência, partiu-se de um código já desenvolvido por Silva, 2005 (baseado no algoritmo de propósitos gerais de Patankar) com algumas rotinas modificadas posteriormente por Centeno, 2014, para simular o problema de formação e oxidação de fuligem.

A escolha do sistema físico impõe grande complexidade ao trabalho, uma vez que o processo de combustão em chamas turbulentas considerando a fuligem e o processo de transferência radiativa em meios participantes já são objetos de estudos que demandam esforço considerável quando avaliados em separado. Assim, a proposta de unir os dois temas traz um desafio ainda maior.

A modelagem numérica desenvolvida utilizou o método de volumes finitos para a solução das equações de conservação de massa, energia, quantidade de movimento e de espécies químicas. Para o campo de fuligem foi utilizado os modelos de formação de Khan e Greeves, 1974, e de oxidação de Magnussen e Hjertager, 1977; para as espécies gasosas foi utilizado um mecanismo de reação com dois passos com o modelo de combustão Eddy Breakup – Arrhenius definindo o cálculo das taxas de reação. O modelo $k-\varepsilon$ padrão foi utilizado para a modelagem da turbulência e o método de ordenadas discretas (DOM) foi implementado para resolver a equação de transferência radiativa (RTE).

O modelo WSGG foi empregado para simular os efeitos radiativos dos gases e da fuligem, incluindo nos cálculos a influência das interações turbulência-radiação (TRI) sobre a transferência de calor radiante. Além dos resultados gerados de maneira acoplada, ao final do trabalho, desenvolveu-se uma análise qualitativa empregando apenas a rotina de cálculo da radiação utilizando campos convergidos de temperatura, frações molares de H₂O e de CO₂ e a fração volumétrica de fuligem alterada, para simular uma condição de aumento de fuligem em

uma área específica da câmara de combustão.

Num primeiro momento alteraram-se as condições de entrada do problema a fim de injetar a fuligem de forma conjunta com o ar da queima. Entende-se que essa é a forma mais simples de incorporar as partículas ao volume de controle, utilizando o transporte por arraste do ar. Após as primeiras tentativas, verificou-se que o modelo de oxidação da fuligem [Khan e Greeves, 1974] faz com que toda a fuligem inserida na câmara seja consumida quase que instantaneamente, não representando o que acontece na prática. O modelo em questão foi utilizado por diversos autores, obtendo bons resultados, porém considerando apenas a oxidação da fuligem que é gerada naturalmente na queima dos combustíveis. Espera-se que a formação da fuligem já aconteça em altas temperaturas e que a sua oxidação aconteça logo à posteriori (ainda em altas temperaturas), justificando o fato de que até então não foi necessária a consideração da temperatura em sua formulação. Em Pourhoseini et al., 2013, e Reddy et al., 2015, foi verificado que a oxidação da fuligem acontece predominantemente em regiões de temperaturas mais altas e, partindo desta consideração, foram gerados campos de frações volumétricas de fuligem alternativos, criados após um ajuste na formulação de oxidação de fuligem, fazendo com que a oxidação aconteça nas regiões da câmara com maiores temperaturas. Para o fenômeno da oxidação da fuligem nas regiões mais frias, é aplicado um fator multiplicador (FM) na Eq. (2.31) que faz com que a modelagem da oxidação da fuligem seja aplicada de forma parcial nas regiões com temperatura abaixo de 1000 K, voltando a ser total na região mais quente da câmara.

A partir dos campos de fração volumétrica de fuligem, foram avaliados os campos do termo fonte de calor radiante, os quais mostraram aumento sensível nos casos em que se injeta fuligem ao serem comparados ao campo que considera apenas a formação de fuligem natural da chama. Também em todos os casos em que se considerou a injeção de fuligem, houve o aumento do fluxo de calor radiante incidido nas paredes. Este aumento está ligado à eficiência da câmara, que depende muito de sua aplicação e características construtivas. O aumento do fluxo de calor radiante na parede chegou a 21,5% quando se considerou a injeção de uma quantidade de 2×10^{-3} em fração mássica de fuligem e foi aplicado um fator multiplicador de 2% na oxidação em regiões frias.

Considerando-se a mesma situação de injeção de fuligem acima, a temperatura máxima no interior da câmara apresentou uma diminuição de 35,2 K (de 1658,9 K para 1623,7 K), se comparada ao caso sem injeção externa. Tal fator é considerado positivo para a vida útil da câmara de combustão, diminuindo a oxidação intensa imposta aos equipamentos

devido às altas temperaturas.

Ao serem comparados os resultados do fluxo de calor transmitido às paredes partindo dos campos de distribuição de fuligem, pôde-se notar a forte influência que a fuligem exerce quando ela está distribuída nas áreas de maior temperatura da câmara. Fato que gerou uma nova análise do problema.

Nesta segunda avaliação, foram gerados novos campos de fuligem considerando a situação de aumentar a concentração de partículas na região com maiores temperaturas da câmara. Realizando o cálculo desacoplado, considerando apenas a radiação, ao dobrar a concentração de fuligem gerada naturalmente pela chama, o fluxo de calor na parede aumentou em 14,5%. Quando o campo original é multiplicado por cinco, fazendo com que a fração volumétrica de fuligem chegue na ordem de $1,2 \times 10^{-6}$, o fluxo de calor na parede praticamente dobra, apresentando um aumento de 99,2%.

No presente trabalho, não são avaliadas algumas questões importantes que estão ligadas ao problema, por serem consideradas externas à câmara de combustão. Entre elas pode-se citar interferências de tubulações de ar e combustível que levam os fluidos até a câmara, assim como seus reservatórios, e também o que se tem a partir da geometria de saída dos gases. No que tange à saída de gases, vale a pena ressaltar que a emissão de fuligem ao meio ambiente pode ser considerada nociva. Apenas como informação adicional, pode-se incluir separadores estáticos na tubulação de saída e também filtros de manga com a finalidade de reter a fuligem que eventualmente pode não ter sido oxidada na câmara. Com a aplicação destes equipamentos, pode-se garantir as normas ambientais e ainda reter as partículas para uma nova injeção na câmara.

7.1 Sugestões de trabalhos futuros

A seguir, são sugeridas algumas propostas para continuidade da presente pesquisa:

- Emprego de outros modelos para a formação/oxidação de fuligem que permitam a injeção de quantidades maiores de partículas;
- Emprego de mecanismo de reação detalhado para a cinética química das espécies, incluindo a fuligem;
- Desenvolvimento de novo modelamento numérico e experimental considerando a injeção de fuligem na região quente da câmara.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Becher, V., Goanta, A., Spliethoff, H., 2012. “Validation of spectral gas radiation models under oxyfuel conditions – Part C: Validation of simplified models”, **International Journal of Greenhouse Gas Control**, vol. 11, pp. 34-51.

Bejan, A., 2004. **Convection Heat Transfer**, John Wiley, Durham, USA.

Bidi, M., Hosseini, R., Nobari, M.R.H., 2008. “Numerical analysis of methane-air combustion considering radiation effect”, **Energy Conversion and Management**, 49, pp. 3634-3647.

Borjini, M.N., Guedri, K., Saïd, R., 2007. “Modeling of radiative heat transfer in 3D complex boiler with non-gray sooting media”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 105, pp. 167 – 179.

Boussinesq, J., 1877. **Essai sur la théorie des eaux courantes**, Imprimerie Nationale, Paris.

Bressloff, N. W., 1999. “The Influence of Soot Loading on Weighted Sum of Grey Gases Solutions to the Radiative Transfer Equation Across Mixtures of Gases and Soot”. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 42, pp. 3469-3480.

Brasil, Empresa de Pesquisa Energética. “Balanço Energético Nacional 2013 – Ano base 2012: Relatório Síntese”, Rio de Janeiro, EPE, 2013.

Brookes, S.J., Moss, J.B., 1999a. “Measurements of soot production and thermal radiation from confined turbulent jet diffusion flames of methane”, **Combustion and Flame**, vol. 116, pp. 49-61.

Brookes, S.J., Moss, J.B., 1999b. “Predictions of soot and thermal radiation properties in confined turbulent jet diffusion flames”, **Combustion and Flame**, vol. 116, pp. 486-503.

Burns, S.P., 1999. “Turbulence-radiation interaction modeling in hydrocarbon pool fire simulations”, **Sandia Report SAND 99-3190**.

Carlson, B.G., Lathrop, K.D., 1968. “Transport theory: the method of discrete ordinates”, **Computer Methods in Reactor Physics**, pp. 165-266.

Cassol, F., “Geração de soluções *benchmark* e avaliação de modelos de radiação térmica em processos de combustão”, Brazil. 2013. **Tese de Doutorado – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica**. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, 2013.

Cassol, F., Brittes, R., Centeno, F.R., Silva, C.V., França, F.H.R., 2014. “Evaluation of the gray gas model to compute radiative transfer in non-isothermal, non-homogeneous participating medium containing CO₂, H₂O and soot”, **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, doi: 10.1007/s40430-014-0168-5.

Cassol, F., Brittes, R., França, F.H.R., Cardoso, C.A.L., 2012. “Influence of soot particulate medium in radiation heat transfer using gray gas model”, **Anais do 14th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering**, RJ, Brazil.

Celik, I.B., Ghia, U., Roache, P.J., Freitas, C.J., Coleman, H., Raad, P.E., 2008. “Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in CFD applications”, **ASME Journal of Fluid Engineering**, vol. 130, pp. 078001-1 - 078001-4.

Centeno, F. R., “Modelagem da radiação térmica em chamas turbulentas da combustão de metano em ar”, Brazil. 2014. **Tese de Doutorado – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica**. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, 2014.

Centeno, F. R., Brittes, R., França, F. H. R., Ezekoye, O. A., 2015, “Evaluation of gas radiation heat transfer in a 2D axisymmetric geometry using the line-by-line integration and WSGG models”, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 156, pp. 1-11.

Chou, P.Y., 1945. "On the velocity correlations and the solution of the equations of turbulent fluctuation", **Quarterly of Applied Mathematics**, vol. 3, pp. 38.

Coelho P.J., 2002. "Evaluation of a model for turbulence/radiation interaction in flames using a differential solution method of the radiative transfer equation", **12th international heat transfer conference**, Grenoble, France, pp. 705 - 710.

Coelho P.J., 2004. "Detailed numerical simulation of radiative transfer in a non-luminous turbulent jet diffusion flame", **Combustion and Flame**, vol. 136, pp. 481 - 492.

Coelho, P.J., 2007. "Numerical simulation of the interaction between turbulence and radiation in reactive flows", **Progress in Energy and Combustion Science**, vol. 33, pp. 311 - 383.

Coelho, P.J., 2012. "Turbulence–Radiation Interaction: From Theory to Application in Numerical Simulations", **Journal of Heat Transfer**, vol. 134, pp. 1-13.

Coelho P.J., 2013. "A theoretical analysis of the influence of turbulence on radiative emission in turbulent diffusion flames of methane", **Combustion and Flame**, vol. 160, pp. 610 - 617.

Coelho, P.J., Carvalho, M.G., 1995. "Modeling of soot formation and oxidation in turbulent diffusion flames", **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, vol. 9, n. 4, pp. 644-652.

Consalvi, J. L., Fengshan, L., Contreras, J., Kashif, M., Legros, G., Shuai, S., Wang, J., 2015. "Numerical study of soot formation in laminar coflow diffusion flames of methane doped with primary reference fuels", **Combustion and Flame**, vol. 162, pp. 1153-1163.

Cotton, M.A., Jackson, J.D., 1990. "Vertical tube air flows in the turbulent mixed convection regime calculated using a low-Reynolds-number $k-\varepsilon$ model", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 33, pp. 275-186.

Davidson, L., 1990. "Calculation of the turbulence buoyancy-driven flow in a rectangular cavity using an efficient solver and two different low Reynolds number $k-\varepsilon$ turbulence models", **Numerical Heat Transfer, Part A**, vol. 18, pp. 129-147.

Demarco, R., Consalvi, J.L., Fuentes, A., Melis, S., 2011. "Assessment of radiative property models in non-gray sooting media", **International Journal of Thermal Sciences**, vol. 50, pp. 1672-1684.

Dorigon, L.J., Duciak, G., Brittes, R., Cassol, F., Galarça, M., França, F.H.R., 2013. "WSGG correlations based on HITEMP 2010 for computation of thermal radiation in non-isothermal, non-homogeneous H₂O/CO₂ mixtures", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 64, pp. 863-873.

Eaton, A.M., Smoot, L.D., Hill, S.C., Eatough, C.N., 1999. "Components, formulations, solutions, evaluations and application of comprehensive combustion models", **Progress in Energy and Combustion Science**, vol. 25, pp. 387-436.

Fairweather, M., Woolley, R.M., 2004. "First-order conditional moment closure modeling of turbulent nonpremixed methane flames", **Combustion and Flame**, vol. 138, pp. 3-19.

Ferziger, H., Perić, M., 1997. "**Computational methods for fluid dynamics**", Springer.

Fluent (ed.), 2009. **Fluent Theory Guide**, Fluent Incorporated, New Hampshire.

Foster, P.J., 1969. "The relation of time-mean transmission of turbulent flames to optical depth", **Journal of the Institute of Fuel**, vol. 42, pp. 179 - 82.

Galarça, M. M., Mossi, A. C., França, F. H. R., 2011, "A modification of the cumulative wavenumber method to compute the radiative heat flux in non-uniform media", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 122, p. 384-393.

Galarça, M. M., "Modelagem espectral da radiação em processos de combustão baseada

no método do número de onda acumulado”, Brazil. 2008. **Tese de Doutorado – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica**. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, 2008.

Garréton, D., Simonin, O., 1994. “Final results”, **Anais do First Workshop of Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces**, vol. 25, EDF-ERCOFTAC, pp. 29 - 35.

Gomes, M.S.P., Nieckele, A.O., Naccache, M.F., Kobayashi, W.T., 1997. “Numerical investigation of the oxygen enriched combustion process in a cylindrical furnace”, **IV International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment**, Lisboa, Portugal.

Gran, I.R., Magnussen, B.F., 1996. “A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. Part 2: influence of combustion modeling and finite-rate chemistry”, **Combustion Science and Technology**, vol. 119, pp. 191–217.

Gupta, A., Haworth, D.C., Modest, M.F., 2013. “Turbulence-radiation interactions in large-eddy simulations of luminous and nonluminous nonpremixed flames”, **Proceedings of the Combustion Institute**, vol. 34, pp. 1281-1288.

Habibi, A., Merci, B., Roekaerts, D., 2007b. “Turbulence radiation interaction in Reynolds-averaged Navier-Stokes simulations of nonpremixed piloted turbulent laboratory-scale flames”, **Combustion and Flame**, vol. 151, pp. 303-320.

Hall, R.J., Vranos, A., 1994. “Efficient Calculations of Gas Radiation from Turbulent Flames”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 37, n. 17, pp. 2745 - 2750.

Haynes, B.S., Wagner, H.G., 1981. “Soot formation”, **Progress in Energy and Combustion Science**, vol. 7, pp. 229–273.

Hinze, J.O., 1975. “**Turbulence**”, McGraw-Hill, New York, USA.

Hottel, H.C., Sarofim, A.F., 1967. **Radiative Transfer**, Ed. McGraw-Hill Book Company, New York, United States of America, 520 p.

Howell, J.R., Perlmutter, M., 1964a. “Monte Carlo solution of thermal transfer through radiant media between gray walls”, **ASME Journal of Heat Transfer**, vol. 86, n. 1, pp. 116-122.

Howell, J.R., Perlmutter, M., 1964b. “Monte Carlo solution of thermal transfer in a nongrey nonisothermal gas with temperature dependent properties”, **AIChE Journal**, vol. 10, n. 4, pp. 562-567.

Ilbas, M., 2005. “The effect of thermal radiation and radiation models on hydrogen-hydrocarbon combustion modeling”, **International Journal of Hydrogen Energy**, vol. 30, pp. 1113 – 1126.

Johansson, R., Leckner, B., Andersson, K., Johnsson, F., 2011. “Account for variations in the H₂O to CO₂ molar ratio when modeling gaseous radiative heat transfer with the weighted sum of grey gases model”, **Combustion and Flame**, vol. 158, pp. 893-901.

Kabashnikov, V.P., Kmit, G.I., 1979. “Influence of turbulent fluctuations on thermal radiation”, **Journal of Applied Spectroscopy**, vol. 31, pp. 963 - 967.

Kaplan, C.R., Baek, S.W., Oran, E.S., Ellzey, J.L., 1994. “Dynamics of a strongly radiating unsteady ethylene jet diffusion flame”, **Combustion and Flame**, vol. 96, pp. 1-21.

Kays, W.M., Crawford, M.E., 1993. **Convective heat and mass transfer**, 3rd ed. New York: McGraw-Hill.

Khan, I.M., Greeves, G., 1974. “A method for calculating the formation and combustion of soot in diesel engines”, em: N. H. Afgan e J. M. Beer, editors, *Heat Transfer in Flames*, capítulo 25. Scripta, Washington DC, 1974.

“Key World Energy Statistics 2014”, **International Energy Agency**, França, 2014.

www.iea.org, acessado em 28/03/2015.

Kolmogorov, A.N., 1942. "Equations of turbulent motion of an incompressible fluid", **Akad. Nauk. USSR, Ser. Phis.**, vol. 6, pp. 56-58.

Köylü, U.O., Faeth, G.M., 1991. "Carbon Monoxide and soot emissions from liquid fuel buoyant turbulent diffusion flames", **Combustion and Flame**, vol. 87, pp. 61-76.

Krebs, W., Koch, R., Bauer, H.J., Kneer, R., Wittig, S., 1994. "Effect of turbulence on radiative heat transfer inside a model combustor", **Eurotherm seminar no. 37 - heat transfer in radiating and combusting systems 2**, pp. 349 - 362, Saluggia, Italy.

Krebs, W., Koch, R., Ganz, B., Eigenmann, L., Wittig, S., 1996. "Effect of temperature and concentration fluctuations on radiative heat transfer in turbulent flames", **26th Symposium (International) on Combustion**, Pittsburgh, pp. 2763 - 2770.

Krishnamoorthy, G., 2010. "A new weighted-sum-of-gray-gases model for CO₂-H₂O gas mixtures", **International Communications in Heat and Mass Transfer**, vol. 37, pp. 1182-1186.

Kuo K.K., 2005. **Principles of combustion**, 2nd ed. New York: Wiley.

Launder, B.E., Sharma, B.I., 1974. "Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of the flow near a spinning disc", **Letters in Heat and Mass Transfer**, vol. 19, pp 519-524.

Launder, B.E., Spalding, D.B., 1972. **Lectures in Mathematical Models of Turbulence**, London: Academic Press.

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

Lesieur, M., Métais, O., Comte, P., 2005. **Large Eddy Simulation of Turbulence**, Cambridge, New York.

Li, G., Modest, M.F., 2001. "An effective particle tracing scheme on structured/unstructured grids in hybrid Finite Volume/PDF Monte Carlo methods", **Journal of Computational Physics**, 173, pp. 187 - 207.

Li, G., Modest, M.F., 2002a. "Application of composition PDF methods in the investigation of turbulence-radiation interactions", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 73, pp. 461 - 472.

Li, G., Modest, M.F., 2002b. "Importance of Turbulence-Radiation Interactions in turbulent reacting flows", **ASME International Mechanical Engineering Congress and Exhibition**, Louisiana, USA.

Lignell, D.O., Chen, J.H., Smith, P.J., Lu, T., Law, C.K., 2007. "The effect of flame structure on soot formation and transport in turbulent nonpremixed flames using direct numerical simulation", **Combustion and Flame**, vol. 151, pp. 2-28.

Magel, H.C., Schneider, R., Schnell, U., Hein, K.R.G., 1995. "Numerical simulation of utility boilers with advanced combustion technologies", **Eighth International Symposium on Transport Phenomena in Combustion**, San Francisco, EUA.

Magel, H.C., Schnell, U., Hein, K.R.G., 1996a. "Modeling of hydrocarbon and nitrogen chemistry in turbulent combustor flows using detailed reaction mechanisms", **3rd Workshop on Modeling of Chemical Reaction Systems**, Heidelberg, Alemanha.

Magel, H.C., Schnell, U., Hein, K.R.G., 1996b. "Simulation of detailed chemistry in a turbulent combustor flow", **26th Symposium (International) on Combustion**, The Combustion Institute, pp. 67-74.

Magnussen, B.F., Hjertager, B.H., 1977. "On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion", **16th Symposium (International) on Combustion**, The Combustion Institute, pp. 719-729.

Maliska, C.R., 2003. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**, 2^a ed., Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, Brasil.

Maurente, A., Vielmo, H.A., França, F.H.R., 2008. “Comparison of the standard weighted-sum-of-gray-gases with the absorption-line blackbody distribution function for the computation of radiative heat transfer in H₂O/CO₂ mixtures”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 109, pp. 1758 – 1770.

Mazumder, S., Modest, M.F., 1999. “A PDF approach to modeling TRI in nonluminous flames”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 42, pp. 971-991.

Mehta, R.S., “Detailed modeling of soot formation and turbulence-radiation interactions in turbulent jet flames”, **Tese de Doutorado**, The Pennsylvania State University, USA, 2008.

Menart, J., 2000. “Radiative transport in a two-dimensional axisymmetric thermal plasma using the S-N discrete ordinates method on a line-by-line basis”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 67, pp. 273-291.

Modest, M. F., 1991, “The weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary solution methods in radiative transfer”, **Journal of Heat Transfer**, Vol. 113, pp.650-656.

Modest, M.F., 2003. **Radiative Heat Transfer**, Academic Press, New York, USA.

Miroslav, S., Stevanovic, Z., Belosevic, S., 2001. “Modeling of non-confined turbulent flow of two coaxial streams under combustion conditions”, **Nonlinear Sciences at the Threshold of the Third Millennium**, vol. 8, pp. 981-988.

Modest M.F., 2005. “Multiscale modelling of turbulence, radiation and combustion interactions in turbulent flames”, **International Journal for Multiscale Computational Engineering**, vol. 3, pp. 85 - 106.

Modest, M.F., Mehta, R.S., 2006. “Modeling absorption TRI in optically thick eddies”, **Eurotherm 78 – Computational Thermal Radiation in Participating Media II**, Poitiers,

France.

Modest, M. F., Zhang H., 2002, “The Full-spectrum Correlated-k Distribution for Thermal Radiation from Molecular Gas-particulates Mixtures”, **Journal of Heat Transfer**, vol. 124, pp. 30-38.

Mossi, A., Barve, V., Galarça, M., Vielmo, H., França, F., Ezekoye, O., 2010a. “Treatment of Spectral Effects in Participating Media Radiation Modelling”, **Anais do 13th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering**, Uberlândia, MG, Brazil.

Mossi, A.C., Barve, V.V., Galarça, M.M., Vielmo, H.A., França, F.H.R., Ezekoye, O.A., 2010b. “Spectral gas absorption coefficient model effects on radiative source term in a 2D axisymmetric diffusion flame”, **Anais do International Heat Transfer Conference - IHCT14**, Washington, DC, USA.

Mossi, A.C., Galarça, M.M., Brittes, R., Vielmo, H.A., França, F.H.R., 2012. “Comparison of spectral models in the computation of radiative heat transfer in participating media composed of gases and soot”, **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, vol. 34, pp. 112-119.

Nieckele, A.O., Naccache, M.F., Gomes, M.S.P., Carneiro, J.E., Serfaty, R., 2001, “Models evaluations of combustion process in a cylindrical furnace”, **Anais do 2001 ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition**, New York, NY.

Nikuradse, J., 1933. **Strömungsgesetze in Rauhen Rohren**, Forsch. Arb. Ing. –Ees.

Patankar, S.V., 1980. **Numerical heat transfer and fluid flow**, Hemisphere, New York.

Patankar, S.V., Spalding, D.B., 1972. “A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 15, pp. 1787.

Paul, S.C., Paul, M.C., 2010. “Radiative heat transfer during turbulent combustion

process”, **International Communications in Heat and Mass Transfer**, vol. 37, pp. 1-6.

Paul, S.C., Paul, M.C., Jones, W.P., 2010. “Large Eddy Simulation of a turbulent non-premixed propane-air reacting flame in a cylindrical combustor”, **Computers and Fluids**, vol. 39, pp. 1832 – 1847.

Pember, R.B., Colella, P., Howel, L.H., Almgren, A.S., Bell, J.B., Crutchfield, W.Y., Beckner, V.E., 1996. “The modeling of a laboratory natural gas-fired furnace with a higher-order projection method for unsteady combustion”, **Technical Report UCRL-JC-123244**, LLNL.

Poinsot, T., Veynante, D., 2005. **Theoretical and Numerical Combustion**, Philadelphia Edwards.

Poitou, D., Amaya, J., El Hafi, M., Cuénot, B., 2012. “Analysis of the interaction between turbulent combustion and thermal radiation using unsteady coupled LES/DOM simulations”, **Combustion and Flame**, vol. 159, pp. 1605 - 1618.

Pope, S.B., 2008. **Turbulent Flows**, Cambridge University, Cambridge.

Pourhoseini, S. H., Saeedi, A., Moghiman, M., 2013. “Experimental and Numerical Study on the effect of soot injection on NO_x reduction and radiation enhancement in a natural gas turbulent flame”, **Arab J Sci Eng**, vol. 138, pp. 69-75.

Prandtl L., 1925. “Über die ausgebildete Turbulenz”, **ZAMM**, vol. 5, pp. 136-139.

Prandtl L., 1945. “Über ein neues Formel system für die ausgebildete turbulenz”, **Nachrichten von der Akad. der wissenschaften in Gottingen, Van den Loek of Ruprecht Gottingen**, pp. 6-19.

Prieler, R., Demuth, M., Spolijaric, D., Hochenauer, C., 2014. “Evaluation of a steady flamelet approach for use in oxy-fuel combustion”, **Fuel**, vol. 118, pp. 55-68.

Reddy, M., De, A., Yadav, R., 2015. "Effect of precursors and radiation on soot formation in turbulent diffusion flame", **Fuel**, vol. 145, pp. 58-72.

Reynolds, O., 1895. "On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion", **Philosophical Transactions of the Royal Society of London**, vol. 186, pp. 349-368.

Roache, P.J., 1994. "Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies", **ASME Journal of Fluid Engineering**, vol. 116, pp. 405-413.

Robinson, G.F., 1985. "A three-dimensional analytical model of a large tangentially-fired furnace", **Journal of the Energy Institute**, pp. 116-150.

Rothman, L. S., Gordon, I. E., Barber, R. J., Dothe, H., Gamache, R. R., Goldman, A., Perevalov, V. I., Tashkun, S. A., Tennyson, J., 2010. "HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database". **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, Vol. 111, pp. 2139-2150.

Rotta, J.C., 1951. "Statistische Theorie nichthomogener Turbulenz", **Zeitschrift fur Physik**, vol. 129, pp. 547-572.

Saario, A., Rebola, A., Coelho, P.J., Costa, M., Oksanen, A., 2005. "Heavy fuel oil combustion in a cylindrical laboratory furnace: measurements and modeling". **Fuel**, vol. 84, pp. 359-369.

Saugat, P., 2006. **Large eddy simulation for incompressible flows: an introduction**, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Germany.

Saji, C.B., Balaji, C., Sundararajan, T., 2008. "Investigation of soot transport and radiative heat transfer in an ethylene jet diffusion flame", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 51, pp. 4287-4299.

Saqr, K.M., Aly, H.S., Sies, M.M., Wahid, M.A., 2010. "Effect of free stream turbulence

on NO_x and soot formation in turbulent diffusion CH₄-air flames”, **International Communications in Heat and Mass Transfer**, vol. 37, pp. 611–617.

Schlichting, H., 1979. **Boundary-layer Theory**, McGraw-Hill, New York.

Siegel, R. Howell, J. R., 2002. **Thermal Radiation Heat Transfer**. 4th ed, Taylor & Francis, New York – London.

Silva, C.V., “Simulação numérica da combustão turbulenta de gás natural em câmara cilíndrica”, Brazil. 2005. **Tese de Doutorado – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica**. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, 2005.

Silva, C.V., França, F.H.R., Vielmo, H.A., 2007, “Analysis of the turbulent, non-premixed combustion of natural gas in a cylindrical chamber with and without thermal radiation”, **Combustion Science and Technology**, 179, pp. 1605-1630.

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

Smith, T.F., Shen, Z.F., Friedman, J.N., 1982. “Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of Gray Gases Model”, **Journal of Heat Transfer**, vol. 104, pp. 602-608.

Snegirev, A.Y., 2004. “Statistical modeling of thermal radiation transfer in buoyant turbulent diffusion flames”, **Combustion and Flame**, vol. 136, pp. 51 - 71.

Spalding, D.B., 1971. “Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames”. **13th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute**, pp. 649-657.

Spalding, D.B., 1977. “Development of the eddy-breakup model of turbulent combustion”, **Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute**, pp. 1657-1663.

Spalding, D.B., 1979. **Combustion and mass transfer**, Pergamon Press, Inc., New York.

Tan E., Foster P.J., 1978. "Radiation through a turbulent medium", **6th International Heat Transfer Conference**, pp. 403 – 408, Toronto, Canada.

Tesner, P.A., Snegiriova, T.D., Knorre, V.G., 1971. "Kinetics of dispersed carbon formation", **Combustion and Flame**, vol. 17, pp. 253-260.

Turns, S.R., 2000. **An introduction to combustion: concepts and applications**, 2nd ed., McGraw-Hill.

Yadav, R., Kushari, A., Eswaran, V, Verma, A.K., 2013. "A numerical investigation of the Eulerian PDF transport approach for modeling of turbulent non-premixed pilot stabilized flames", **Combustion and Flame**, vol. 160, pp. 618-634.

Yang, W., Blasiak, W., 2005. "Numerical study of fuel temperature influence on single gas jet combustion in highly preheated and oxygen deficient air", **Energy**, vol. 30, pp. 385-398.

Versteeg, H.K., Malalasekera, W., 2007. **An introduction of computational fluid dynamics: the finite volume method**, 2nd ed., Prentice Hall, USA.

Wang, A., Modest, M.F., Haworth, D.C., Wang, L., 2008. "Monte Carlo simulation of radiative heat transfer and turbulence interactions in methane/air jet flames", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 109, pp. 269 - 279.

Wang, Y., Raj, A., Chung, S. H., 2015. "Soot modeling of counterflow diffusion flames of ethylene-based binary mixture fuels", **Combustion and Flame**, vol. 162, pp. 586-596.

Wilcox, D.C., 2006. **Turbulence modeling for CFD**, DCW Industries, La Cañada, USA.