

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

MODELAGEM DA RADIAÇÃO TÉRMICA EM CHAMAS LAMINARES DA
COMBUSTÃO DE METANO EM AR

por

Anderson Mossi

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, abril de 2011.

MODELAGEM DA RADIAÇÃO TÉRMICA EM CHAMAS LAMINARES DA
COMBUSTÃO DE METANO EM AR

por

Anderson Mossi
Mestre em Engenharia

Tese 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

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Co-Orientador: Prof. Dr. Horácio Antônio Vielmo

Aprovada por:

Prof. Dr. Arno Krenzinger, PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Cristiano Vitorino da Silva, DEM / URI

Prof. Dr. Luís Fernando Figueira da Silva, DEM / PUC

Prof. Dr. Francis H. R. França
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 29 de abril de 2011.

AGRADECIMENTOS

Esta seção normalmente é a única de caráter pessoal em uma Tese de Doutorado, onde o autor pode expressar o agradecimento a todos que colaboraram no difícil e longo caminho que leva à realização do trabalho.

Por uma lamentável fatalidade, o autor deste trabalho, Anderson Chaves Mossi, faleceu repentinamente, de causa natural, poucos dias após a entrega do texto escrito à banca de avaliação. A notícia causou a mais profunda consternação e tristeza aos familiares e aos inúmeros amigos. Para todos, ficou a sensação de uma perda irreparável de alguém que partiu cedo demais.

Com a tese concluída, decidiu-se seguir com o processo de avaliação do trabalho para possibilitar a concessão póstuma do Título de Doutor ao Anderson. O trabalho foi apresentado pelos próprios orientadores em 29 de abril de 2011, recebendo aprovação unânime da banca. Mais do que uma homenagem, a concessão do título foi um reconhecimento de direito pelo brilhante trabalho realizado durante o Doutorado.

O Anderson nasceu em 9 de abril de 1981, na cidade de Passo Fundo, RS, onde foi criado pelos pais, João Clóvis Mossi e Marilandi Catarina Mossi. Sua avó materna, Maria Helena Torres de Chaves, também foi muito importante e presente na criação dele e de seu irmão Charlen Mossi.

Os seus primeiros anos de estudos, do 1º ao 2º Grau, foram passados na Escola Estadual Cardeal Arcoverde, em Passo Fundo. No período de 2001 a 2004, ele realizou o curso de Matemática na Universidade Estadual de Ponta Grossa, PR. Em 2005, o Anderson ingressou no Mestrado Acadêmico no PROMEC (UFRGS), onde realizou pesquisa na área de Fenômenos de Transporte sob orientação dos mesmos orientadores de Doutorado, obtendo o título de Mestre em Engenharia em 2007. Logo em seguida, iniciou os estudos de Doutorado na área de modelagem da radiação térmica em gases de combustão. Nesse período, ele passou um ano em Austin, Texas, realizando doutorado-sanduíche sob orientação do prof. Ofodike Ezekoye. Em 2010, ingressou como professor na Universidade Federal da Fronteira Sul, Campus de Erechim, na área de Engenharia Ambiental.

Em sua breve, mas produtiva vida acadêmica, ele produziu importantes trabalhos, com cinco publicações em periódicos científicos, além de várias outras publicações e apresentações em conferências no Brasil e EUA. Outros trabalhos devem vir a ser publicados constando seu nome como primeiro autor, a partir dos importantes resultados obtidos nesta Tese de Doutorado, ainda inéditos.

Sendo esta uma seção de agradecimentos, resta a nós, orientadores do Anderson, agradecer pela oportunidade de ter conhecido e trabalhado com um jovem de tão grande talento, um querido amigo de todos no grupo, sempre se destacando pela atitude positiva e pelo bom humor. Agradecemos em particular a Charlen Mossi por nos ajudar a recuperar o material mais recente produzido pelo irmão. A ajuda foi fundamental para que pudéssemos imprimir com maior facilidade a versão final da Tese. O material também nos permitirá dar continuidade à pesquisa iniciada por ele e a publicar seus mais recentes resultados na literatura especializada.

Em nome do Anderson agradecemos a todos aqueles que cooperaram, de qualquer forma, com seu trabalho científico, incluindo o CNPq, leia-se a nação brasileira, por sua bolsa de doutorado que, não obstante a sua tragédia pessoal, terminou por atingir pleno sucesso.

Finalmente, expressamos nossos mais sinceros sentimentos à sua família, em particular aos pais, à avó materna e ao irmão. Sabemos que as muitas lembranças felizes que o Anderson deixou ficarão para sempre em seus corações; esperamos que elas ajudem a superar este período difícil e sejam fontes inesgotáveis de conforto em suas vidas.

Francis H. R. França

Horácio A. Vielmo

RESUMO

Este trabalho analisa os efeitos da transferência de calor por radiação térmica em uma chama laminar resultante da combustão de metano com ar. No processo, são resolvidas as equações da continuidade, da quantidade de movimento, da conservação das espécies químicas e da energia. Ainda é utilizado um modelo de formação de fuligem a duas equações e o modelo de combustão de Arrhenius considerando um mecanismo com 112 reações químicas. Para avaliar os efeitos da radiação térmica, o divergente do fluxo radiante é calculado considerando quatro modelos diferentes para os gases: o modelo do gás cinza, a soma ponderada de gases cinzas, e os métodos SLW e CW. Nessa modelagem, é considerado um meio participante composto por monóxido de carbono, dióxido de carbono, vapor d'água e fuligem. No modelo do gás cinza e da soma ponderada de gases cinzas, o coeficiente de absorção da mistura é obtido por correlações que consideram a temperatura local e a concentração do meio. Nos modelos SLW e CW, o coeficiente de absorção é calculado baseado no banco de dados HITEMP. Assim, primeiramente os resultados do divergente do fluxo radiante são confrontados com os diferentes modelos considerando campos pré-estabelecidos de temperatura e concentrações da mistura de gases com a presença de fuligem e, em seguida, é feita uma análise da influência da radiação considerando uma chama difusa oriunda do processo de combustão de metano com ar. Apesar de o meio analisado ser opticamente fino, situação em que os efeitos da absorção são muito baixos, os resultados encontrados para o divergente do fluxo radiante com os modelos de radiação usados na pesquisa mostraram uma diferença média de aproximadamente 20% entre os modelos, chegando a uma diferença máxima local de mais de 50% quando foi considerado o modelo WSGG. Por outro lado, nas situações em que é considerado todo o processo de combustão, a diferença maior ocorre na comparação de casos em que a radiação térmica é negligenciada com os casos em que a radiação é considerada. Os efeitos causados entre os diferentes modelos de radiação no campo de temperaturas e concentrações dos gases foram pequenos. Assim, é observado que, mesmo em meios opticamente finos, a modelagem da radiação térmica é necessária, pois causa diferenças significativas nos resultados e que nesse tipo de meio não é necessário o uso de modelos mais sofisticados de radiação, pois os efeitos da absorção dos gases é muito pequeno.

Palavras-chave: Radiação térmica; meios participantes; combustão; fuligem.

ABSTRACT

This work analyses the effects of thermal radiation heat transfer on methane-air laminar diffusion flames. The analysis is based on the solution of the equations of continuity, fluid motion, species mass-fraction and enthalpy. The soot formation is accounted with a two-equation model while a chemistry mechanism with 112 reactions is used for the combustion of methane. To evaluate the effects of thermal radiation, the divergence of the radiative heat flux is calculated based on four different gas models: the gray gas, the weighted sum of gray gases, the SLW and the CW model. In the modeling, it is considered a participating media composed of carbon monoxide, carbon dioxide, water vapor and soot. Both in the gray gas model and in the weighted sum of gray gases model, the absorption coefficient of the mixture is obtained by correlations that depend on the local temperature and concentration of the medium. On the other hand, in the SLW and CW models, the absorption coefficient is calculated based on the HITEMP spectral database. Thus, the results of the divergence of the radiative heat flux are compared with the different gas models based on a temperature and concentration fields previously obtained, and then, the four gas models used are considered in the entire combustion process to verify the influence of the radiation heat transfer. The results obtained for the divergence of the radiative heat flux considering the four different radiation models used showed an averaged difference of 20%, with a maximum local difference of more than 50%, when the WSGG model was considered. On the other hand, in situations where the whole combustion process is considered, the major difference occurs when is compared the results obtained with a radiation model and the ones where it is neglected. The effects observed with the different radiation models in the temperature field and the gas concentrations were small. Thus is observed that, even in optically thin media, the thermal radiation gas modeling is necessary, and in this particular kind of media, the use of sophisticated gas models are not necessary, because the absorption effect fo the gases are small when compared with their emission.

Keywords: Thermal radiation; participating media; combustion; soot.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO.....	1
1.1	Objetivos da pesquisa	1
1.2	Revisão da literatura	2
1.3	Organização da tese	10
2	EQUAÇÕES GOVERNANTES DO PROCESSO DE COMBUSTÃO DE CHAMAS LAMINARES EM CÂMARAS CILÍNDRICAS	12
2.1	Equação da conservação de massa	12
2.2	Equações da quantidade de movimento.....	12
2.3	Equação da conservação das espécies	13
2.4	Formação de fuligem	14
2.5	A equação da energia.....	17
2.6	Propriedades termofísicas	18
3	RADIAÇÃO TÉRMICA EM MEIOS PARTICIPANTES.....	21
3.1	A intensidade de radiação em meios não-participantes	21
3.2	A intensidade de radiação em meios participantes	23
3.2.1	Equação do Transporte Radiante	24
3.2.2	O coeficiente de espalhamento	26
3.2.3	O coeficiente de absorção	27
3.2.4	Alargamento Natural	27
3.2.5	Alargamento Doppler	28
3.2.6	Alargamento por Colisão	28
3.2.7	Alargamento Stark	29
3.2.8	A função de fase	31
3.3	A equação do transporte radiante em coordenadas cilíndricas	32
4	MODELAGEM DO COEFICIENTE DE ABSORÇÃO DOS GASES	38
4.1	Linha por Linha (LBL)	38
4.2	Modelo do Gás Cinza	39
4.3	O Modelo da Soma ponderada de gases cinzas	41
4.4	O Modelo da soma ponderada de gases cinzas baseado nas linhas espectrais (SLW) ..	43
4.4.1	A função Distribuição ALB	44
4.4.2	O modelo SLW	48
4.5	O Modelo do Número de Onda Cumulativo (CW)	51
5	ESQUEMAS NUMÉRICOS E MODELOS COMPUTACIONAIS	61
5.1	O Método dos Volumes Finitos em Coordenadas Cilíndricas Axissimétricas.....	62
5.2	Esquemas de Interpolação	64
5.2.1	QUICK.....	64
5.2.2	Híbrido.....	67
5.3	Acoplamento da Pressão com a Velocidade.....	68
5.4	Solução do Sistema de Equações Gerado pelo Método dos Volumes Finitos	70
5.5	Discretização da Equação do Transporte Radiante	71

5.6	O método das ordenadas discretas	73
6	CÁLCULOS DO DIVERGENTE DO FLUXO DE CALOR POR RADIAÇÃO.	76
7	INFLUÊNCIA DOS DIFERENTES MODELOS DE RADIAÇÃO TÉRMICA NO PROCESSO DE COMBUSTÃO	93
7.1	Validação das Simulações	93
7.2	Comparação entre os Diferentes Modelos de Radiação Térmica	96
8	CONCLUSÕES E PROPOSTAS PARA TRABALHOS FUTUROS.....	107
8.1	Conclusões	107
8.2	Propostas para Trabalhos Futuros.....	109
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	110
	APÊNDICE A – REAÇÕES QUÍMICAS USADAS NA MODELAGEM DA COMBUSTÃO DE METANO COM AR.....	116
	APÊNDICE B – COMPARAÇÃO ENTRE OS BANCOS DE DADOS ESPECTRAIS HITRAN E HITEMP	120

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 – Variação do fluxo de energia distante de uma fonte	22
Figura 3.2 – Meio que absorve, emite e espalha radiação	24
Figura 3.3 – Redirecionamento da intensidade radiante por espalhamento	26
Figura 3.4 – Sistema utilizado em geometrias cilíndricas.	33
Figura 4.1 – Coeficiente de absorção para 10% H ₂ O a uma temperatura de 2000 K (HITEMP)	40
Figura 4.2 – Partes do espectro em que a função ALB é calculada.	44
Figura 4.3 – Seções transversais usadas no modelo SLW.....	49
Figura 4.4 – Forma esquemática do número de onda cumulativo [Solovjov e Webb, 2002]. .	53
Figura 4.5 – Dependência do número de onda cumulativo com a concentração [Solovjov e Webb, 2002].	54
Figura 4.6 – Dependência do número de onda cumulativo com uma constante adicionada ao espectro [Solovjov e Webb, 2002].	55
Figura 4.7 – Modelagem espectral dos gases cinzas fracionários [Solovjov e Webb, 2002]...	58
Figura 5.1 – Modelo de discretização.....	63
Figura 5.2 – Parâmetros envolvidos na dedução da forma generalizada para interpolação na direção x	65
Figura 5.3 – Variação do coeficiente a_E com o número de Peclet [Patankar, 1980].....	68
Figura 5.4 – Número de pontos para a solução S-8 no primeiro octante.	74
Figura 6.1 – Comparação entre os resultados com o método LBL.	77
Figura 6.2 – Comparação entre os resultados obtidos pelo método CW.....	79
Figura 6.3 – Comparação entre os Resultados obtidos por Denison e Webb, 1995, e o presente trabalho utilizando o método SLW.....	80
Figura 6.4 – Comparação entre os resultados obtidos com o método SLW.....	80
Figura 6.5 – Comparação entre os resultados obtidos com o modelo WSGG e cálculos linha- por-linha considerando o problema descrito no caso 3.	82
Figura 6.6 – Divergente do fluxo radiante calculado pelo modelo do gás cinza e comparado com cálculos linha-por-linha para o meio descrito no caso 3.....	83
Figura 6.7 – Divergente do fluxo radiante calculado pelo modelo do gás cinza e comparado com cálculos linha-por-linha para o meio descrito no Caso 4.....	84

Figura 6.8 – Câmara cilíndrica considerada nesse trabalho.	85
Figura 6.9 – Domínio computacional usado nas simulações (fora de escala).....	85
Figura 6.10 – Malha utilizada nas simulações.....	86
Figura 6.11 – Variação do tempo computacional requerido para 500 passos de tempo, de acordo com o número de processadores usados.	87
Figura 6.12 – Campo de temperatura e concentrações de H ₂ O e CO ₂ usadas nas simulações.	88
Figura 6.13 – Concentração de CO (ampliado na região da chama) e de Fuligem (ppm)	88
Figura 6.14 – Divergente do fluxo radiante calculado com o modelo CW e as distribuições de O ₂ e N ₂ ao longo da geometria.	89
Figura 6.15 – Divergente do fluxo de calor radiante calculado com o modelo WSGG e diferença em relação ao modelo CW.....	90
Figura 6.16 – Emissividade total e as correlações para uma mistura composta por 20% H ₂ O e 10% CO ₂	91
Figura 6.17 – Divergente do fluxo de calor radiante calculado com o modelo do gás cinza e com o modelo SLW, e as respectivas diferenças em relação ao modelo CW.....	92
Figura 7.1 – Linhas de temperatura usadas nas comparações com os dados experimentais obtidos por Kaplan et al., 1996.....	93
Figura 7.2 – Comparação dos perfis de temperatura com os dados experimentais obtidos por Kaplan et al., 1996.....	96
Figura 7.3 – Vetores de velocidade juntamente com o campo de temperatura.....	97
Figura 7.4 – Distribuição de temperatura e concentração de H ₂ O.	98
Figura 7.5: Concentrações de CO ₂ e CO.	99
Figura 7.6 – Distribuição de fuligem e concentração de OH.	100
Figura 7.7 – Diferença de temperatura (dif. Temp = temp _{gás cinza} - temp _{sem rad}) e diferença relativa de H ₂ O (dif. H ₂ O = (H ₂ O _{gás cinza} - H ₂ O _{SLW})/H ₂ O _{gás cinza, máx}).....	101
Figura 7.8 – Diferença relativa de CO ₂ e diferença relativa de CO (fórmulas análogas a do H ₂ O).....	102
Figura 7.9 –Diferença na distribuição de fuligem e na concentração de OH (fórmulas análogas a do H ₂ O).....	103
Figura 7.10 – Diferença de temperatura (dif. Temp = Temp _{gás cinza} - Temp _{SLW}) e diferença relativa de H ₂ O (dif. H ₂ O = (H ₂ O _{gás cinza} - H ₂ O _{SLW})/H ₂ O _{gás cinza, máx}).....	105
Figura 7.11 – Diferença relativa de CO ₂ e diferença relativa de CO.	105

Figura 7.12 – Diferença na distribuição de fuligem e na concentração de OH.....	106
Figura B.1 – Espectro obtido para 100% CO ₂ (temperatura de 750 K).	120
Figura B.2 – Espectro obtido para 100% CO ₂ (temperatura de 2000 K).	121
Figura B.3 – Dependência do coeficiente de absorção das moléculas de CO ₂ em relação à concentração na temperatura de 1000 K (HITEMP).	122
Figura B.4 – Dependência do coeficiente de absorção das moléculas de H ₂ O em relação à concentração na temperatura de 1000 K (HITEMP).	123

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Reações usadas na modelagem da fuligem.....	16
Tabela 3.1 – Nomenclatura utilizada nos banco de dados HITRAN e HITEMP.....	30
Tabela 4.1 – Ajustes polinomiais para o coeficiente de absorção dos gases.....	41
Tabela 4.2 – Coeficientes usados no modelo WSGG.....	43
Tabela 4.3 – Valores dos coeficientes a_{lmn} para H ₂ O.	46
Tabela 4.4 – Valores dos coeficientes b_{lmn} para H ₂ O.	47
Tabela 4.5 – Valores dos coeficientes a_{lmn} para CO ₂	48
Tabela 5.1 – Valores específicos que o coeficiente difuso (Γ^Φ) e o termo fonte (S^Φ) assumem na equação genérica do transporte.....	62
Tabela 5.2 – Direções e pesos usados pelo método das ordenadas discretas	75
Tabela 6.1 – Valores do coeficiente de absorção e dos coeficientes polinomiais obtidos com base no banco de dados HITEMP para o modelo WSGG.....	81
Tabela A.1 – Mecanismos de reação usados nos cálculos das chamas.	116

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ALB	Linha de absorção do corpo negro
CDSD	Banco de dados espectral para dióxido de carbono
CW	Número de onda cumulativo
ETR	Equação do transporte radiante
FSK	Método da distribuição-k que considera todo o espectro
HITEMP	Banco de dados espectrais calculado à temperatura de 1000 K
HITRAN	Banco de dados espectrais calculado à temperatura ambiente
LBL	Linha por linha
QUICK	Esquema de interpolação quadrático para os termos convectivos
SIMPLE	Método Semi-Implícito para acoplar a pressão com a velocidade
SIMPLEC	Método Semi-Implícito Corrigido para acoplar a pressão com a velocidade
SIMPLER	Método Semi-Implícito Revisado para acoplar a pressão com a velocidade
SLW	Linhas Espectrais baseadas no modelo WSGG
TDMA	Algoritmo para solução de matrizes tri-diagonais
USM	Modelo de combustão unificado de segunda ordem
WSGG	Soma ponderada de gases cinzas

LISTA DE SÍMBOLOS

a_j	Função de ponderação
a_i	Coefficientes no método dos volumes finitos ($i = P, E, W, N, S$)
c_p	Calor específico, J/kgK
c_a	Taxa de aglomeração
c_{min}	Número de átomos de carbono em um incipiente
c_{pi}	Calor específico da espécie i
c	Velocidade da luz
c_i	Coefficientes polinomiais ($i = 0, 1, \dots, 5$)
d_p	Diâmetro médio da partícula de fuligem
$dN(R)$	Número de partículas por unidade de volume em uma faixa de raio
f_v	Concentração de fuligem
g	Aceleração da gravidade, m/s ²
h	Entalpia
$h_{i,ref}$	Entalpia de referência da espécie i
i_η	Intensidade espectral
$i_{\eta b}$	Intensidade espectral do corpo negro
$i_{\eta,e}$	Intensidade espectral emitida
k	Taxa dos coeficientes para a reação
k_i	Condutividade térmica de cada espécie i
k_{mix}	Condutividade térmica da mistura
k	Condutividade térmica, W/mK
k_η	Coefficiente de absorção espectral
\hat{n}	Vetor normal a uma superfície
p	Pressão, atm
q	Fluxo radiante, W
r	Posição radial, m

\dot{r}_i	Taxa de geração da espécie i
\dot{r}	Termo fonte para a fração de massa da fuligem
\dot{r}_N	Termo fonte para a massa específica da fuligem
r_w	Ponto localizado na superfície
s_η	Seções transversais de espalhamento espectral
t	Tempo, s
u	Componente axial da velocidade, m/s
u_{th}	Componente axial da velocidade termoporética, m/s
u_{ij}	Fator local de correção usado no modelo CW
v	Componente radial da velocidade, m/s
v''_{ik}	Coefficientes estequiométricos da reação elementar
v'_{ik}	Coefficientes estequiométricos da reação elementar
v_{th}	Componente radial da velocidade termoporética, m/s
v_{ij}	Função definida por um ponto de referência no modelo CW
w_k	Taxa da k -ésima reação
w	Função número de onda cumulativo
w	Pesos no método das ordenadas discretas
x_i	Peso molecular da espécie i
z	Posição axial, m
A_s	Área superficial da fuligem por unidade de volume
A	Área
C_1	Constante da distribuição espectral de Planck, $0,59552137 \times 10^{-16} \text{ W} \cdot \text{m}^2/\text{sr}$
C_2	Constante da distribuição espectral de Planck, $0,014387752 \text{ m} \cdot \text{K}$
C_η	Espectro da seção transversal de absorção, $\text{cm}^2/\text{molec.}$
C_{abs}	Seção transversal de absorção
D_i	Coefficiente de difusão da espécie i .
D_{ij}	Coefficiente de difusão binário
$D_{i,mix}$	Coefficiente de difusão da mistura
D	Diâmetro das moléculas
D	Intensidade dos termos difusos

E	Leste
F	Função distribuição ALB
F	Intensidade dos termos convectivos
F_i	Taxa do fluxo de massa na face i
J	Fluxo total da variável genérica Φ
J_{ij}	Intensidade do gás cinza fracional
L	Distância entre duas placas infinitas
Le_i	Número de Lewis
$M_{C(s)}$	Peso molecular do carbono
M_i	Peso molecular da espécie i .
N	Densidade molecular, molec./cm ³
N	Norte
N_s	Número de densidade da fuligem
N	Número de Avogrado
P	Pressão, Pa
Pe	Número de Peclet
Q_η	Energia espectral
$Q_{s\eta}$	Fator de eficiência do espalhamento
R	Constante universal dos gases
S	Direção de um feixe
S	Superfície
\hat{S}'	Vetor que indica uma direção
S_{ij}	Intensidade da linha, cm ⁻¹ / (molec × cm ⁻²)
S^Φ	Termo fonte da variável Φ
S	Sul
T	Temperatura, K
V	Volume
W_i	Peso molecular da espécie i .
W	Oeste
Y_s	Concentração da fuligem

α	Coeficientes geométricos
γ	Meia largura para o alargamento
ε	Taxa de dissipação turbulenta, m^2/s^3
ε	Máxima energia característica de atração entre duas moléculas
ε	Emissividade
η	Número de onda
η	Cosseno diretor
θ	Ângulo polar, rad.
κ	Constante de Stefan-Boltzmann
λ	Difusividade térmica
μ	Viscosidade dinâmica Ns/m^2
μ	Direções no método das ordenadas discretas
$\mu_{i,mix}$	Viscosidade da mistura
μ_i	Viscosidade de cada espécie i
μ	Cosseno diretor
ξ	Direção no método das ordenadas discretas
ξ	Cosseno diretor
ρ	Massa específica
$\rho_{C(s)}$	Massa específica das partículas de carbono
σ	Diâmetro médio de colisão das moléculas
$\sigma_{s\eta}$	Coeficiente de espalhamento espectral
φ	Ângulo azimutal, rad.
ω	Ângulo sólido
Γ	Coeficiente difuso genérico na equação do transporte
\square_i	Fator de eficiência de colisão da espécie i sobre as partículas de carbono
\square_{ij}	Relação binária das espécies i e j
\square_η	Função de fase
Φ	Variável genérica na equação do transporte
$\Omega_{i,\mu}$	Integral de colisão para a viscosidade
$\Omega_{D,ij}$	Integral de colisão para a difusividade
Ω'	Ângulo sólido

1 INTRODUÇÃO

Com o rápido crescimento econômico do país, e com as estimativas de que continuará neste ritmo nos próximos anos, faz com que a demanda por energia chegue a níveis impensáveis há cerca de duas décadas. O consumo desta energia envolve, muitas vezes, processos de combustão de combustíveis fósseis. Por outro lado, esse crescimento gera o aumento das preocupações ambientais, pois os poluentes emitidos no processo de combustão aceleram o aquecimento global.

Uma maior eficiência no processo de combustão, não somente do ponto de vista ambiental, acarretaria também em um aumento significativo no lucro industrial, pois as indústrias teriam uma economia de energia elétrica, em uma redução no uso de combustíveis, um aumento de produtividade devido à melhoria da eficiência, uma redução na emissão dos gases poluentes, entre outros. Por todos esses motivos, uma atenção especial à pesquisa envolvendo processos de combustão é necessária, pois ao mesmo tempo em que o governo cria leis que visam a reduzir a emissão de gases e assina tratados internacionais que limitam a emissão de poluentes, anuncia aumentos na planta de energia elétrica gerada por termelétricas movidas a óleo combustível e a carvão, sem citar o aumento de emissões de gases causadores do efeito estufa gerados pelo crescimento industrial e pela melhoria do poder econômico da população, que passa a utilizar cada vez mais automóveis para a locomoção.

A demanda por processos de combustão melhores e mais eficientes é uma tendência mundial. Por exemplo, nos EUA, o departamento de energia anunciou um plano que visa limitar as emissões nos sistemas de combustão industriais, o qual deve ser implantado até o ano de 2020. O projeto cita como objetivos reduzir em 90% as emissões de CO₂, limitar as emissões de NO_x e CO e ainda prevê reduzir o consumo de combustível entre 20% e 50%. Nesse sentido, é importante desenvolver pesquisas relacionadas à combustão, pois é um fenômeno que abrange uma série de complexidades e é uma área em que, apesar de ter obtido avanços significativos, ainda há uma distância muito grande a ser percorrida.

1.1 Objetivos da pesquisa

O fenômeno conhecido por combustão resulta de reações químicas envolvidas em uma série de iterações entre advecção e difusão. Essas iterações são descritas pelas equações de balanço para a continuidade, quantidade de movimento, energia e fração mássica das espécies

químicas envolvidas. Essas equações são não-lineares e necessitam de técnicas numéricas específicas para encontrar a solução do problema. Cada uma das equações envolvidas, por si só, são muito complexas. Por exemplo, na equação da quantidade de movimento, muitas vezes é necessário resolver um escoamento turbulento, na equação da energia deve-se calcular satisfatoriamente as perdas por radiação, na equação da fração mássica das espécies químicas, deve-se calcular a emissão de gases como CO, NO_x, a formação de fuligem, etc., sendo que todos esses fenômenos são acoplados e uma mudança em um deles já afetaria todos os demais.

Dando um enfoque especial à equação da energia, a literatura não está completamente clara a respeito dos efeitos causados pela radiação térmica no processo de combustão, pois os gases e as partículas sólidas geradas durante a queima do combustível têm a capacidade de absorver, emitir e em algumas vezes espalhar a radiação térmica. Como as taxas de calor por radiação podem ser responsáveis por até um terço da transferência de calor, uma boa modelagem do termo fonte radiante é mandatória para a obtenção de resultados mais próximos da realidade e para um bom entendimento do fenômeno. Mas calcular o termo fonte radiante com exatidão é praticamente impossível em cálculos dessa magnitude, pois o coeficiente de absorção dos gases é uma função que varia intensamente com o número de onda, portanto sua modelagem é mandatória para a solução do problema em um tempo viável. Sendo assim, este trabalho tem como objetivo principal estimar os efeitos relacionados à radiação térmica no processo de combustão, e comparar os resultados obtidos com diferentes modelos do coeficiente de absorção dos gases disponíveis na literatura, desde o mais simples até os modelos espectrais mais sofisticados que estão apresentados na literatura.

1.2 Revisão da literatura

Considerando a vasta gama de aplicações da transferência de calor radiante em gases nos processos atmosféricos e na combustão, e ainda a crescente exigência por processos de combustão limpa, o estudo da modelagem radiante em meios participantes ganha cada vez maior importância nos estudos de transferência de calor. Contudo, a modelagem da transferência de calor por radiação térmica é mais difícil em gases do que qualquer outro meio participante, como por exemplo, partículas suspensas, por que o coeficiente de absorção dos gases apresenta uma forte variação com o número de onda. Por outro lado, as propriedades radiantes das partículas suspensas, como a fuligem, variam lentamente com o número de onda e de forma linear, tornando os cálculos mais simples e rápidos.

Para se atingir resultados confiáveis, cálculos da transferência de calor por radiação térmica devem ser tratados de forma espectral, seguido por uma integração sobre todos os números de onda para a obtenção das taxas totais de transferência de calor. Em meios onde as propriedades radiantes variam lentamente, o cálculo é feito dividindo o espectro em bandas onde as propriedades possam ser assumidas como lineares. Assim, a equação da transferência radiante é resolvida em cada banda e a taxa total de transferência é encontrada simplesmente pelo somatório do resultado em todas as bandas. Em meios onde as propriedades variam fortemente com o número de onda, como em gases participantes, o cálculo da transferência de calor é muito dispendioso, considerando-se que a energia radiante na região do infravermelho apresenta centenas de milhares de linhas espectrais.

Modelos para as propriedades radiantes dos gases encontrados na literatura baseados em médias sobre todas as linhas espectrais são conhecidos como modelos de banda larga; os que consideram pequenas regiões do espectro para a determinação das propriedades dos gases são conhecidos como modelos de banda estreita. Dentre os vários modelos de gases disponíveis na literatura, o mais antigo e simples é o modelo do gás cinza, onde o coeficiente de absorção é assumido constante e as únicas variáveis são a temperatura e a concentração; dessa forma, a quantidade de energia emitida varia de acordo com a função de Planck. Contudo, esse modelo representa uma aproximação muito rudimentar, normalmente não sendo capaz de fornecer resultados precisos. O modelo da soma ponderada de gases cinzas (WSGG), desenvolvido por Hottel e Sarofim, 1967, considera que o meio participante é composto por gases cinzas, e a ponderação de cada um desses gases cinzas é determinada de acordo com a fração de energia radiante no intervalo espectral em que cada um está contido. Hottel e Sarofim, 1967, desenvolveram o modelo WSGG dentro do contexto do método das zonas desenvolvido por Hottel e Cohen, 1958. Smith et al., 1982, propuseram correlações para os coeficientes de absorção e para os pesos de cada um desses coeficientes tanto para as moléculas de H_2O , tanto para as de CO_2 . Posteriormente, Modest, 1991, aplicou o método WSGG à equação do transporte radiante, possibilitando a obtenção da solução por qualquer método de solução disponível para a equação do transporte radiante. Dentre os modelos existentes, atualmente esse é o mais conhecido e amplamente usado em softwares comerciais, devido à sua fácil implementação e por apresentar resultados expressivamente melhores do que o modelo do gás cinza.

Com a criação dos bancos espectrais, como HITRAN, HITEMP, CDSD, entre outros, e com a melhoria dos recursos computacionais, tornou-se possível fazer cálculos considerando cada ponto do espectro de absorção, como o método linha por linha (LBL),

desenvolvido por Hartmann et al., 1983, mas ainda hoje a obtenção de resultados por esse método é muito lenta inclusive em problemas unidimensionais, devido ao grande número de equações a ser resolvidas. Por outro lado, essas soluções são consideradas muito próximas da exata e servem como base de comparação para os demais modelos espectrais.

Para simplificar a dependência do coeficiente de absorção dos gases com o número de onda, a distribuição- k é um modelo que reduz a extensão dos cálculos, pois assume que a intensidade espectral do corpo negro local não varia significativamente ao longo de uma banda de absorção e pode ser tratada como constante sobre essa banda. Esse método mostrou-se ineficiente quando as propriedades ou a temperatura do gás não são homogêneas. Como em meios não-isotérmicos o estado termodinâmico do gás muda continuamente com a posição, Goody e Yung, 1989, propuseram o método k -correlacionado, que é baseado na observação de que em um intervalo pequeno de número de onda, a transferência radiante não varia com a posição exata das linhas espectrais, assim essas linhas podem ser rearranjadas dentro do mesmo intervalo sendo que a transferência de calor radiante não é afetada. Dessa forma, ao mudar o estado termodinâmico do gás, o método correlaciona o coeficiente de absorção a partir de um conhecido em uma condição de referência.

Denison e Webb, 1993a, desenvolveram o modelo SLW, o qual trabalha sobre um espectro de baixa resolução usando a mesma ideia da soma ponderada de gases cinzas. Este método mostrou-se bom em casos homogêneos e isotérmicos, mas para casos não-homogêneos e/ou não-isotérmicos, o método apresentou diferenças em até 40% nas regiões quentes, em comparação com o LBL, pois ao considerar um espectro de baixa resolução, a grande variação do coeficiente de absorção em um pequeno intervalo de número de onda não é considerada.

Com a criação da função distribuição ALB por Denison e Webb, 1993b, que é definida como a fração de energia do corpo negro nas partes em que as linhas espectrais do coeficiente de absorção ficam abaixo de uma seção transversal constante C , o modelo SLW melhorou significativamente ao ser usado juntamente com essa função, sendo que a diferença nos resultados para meios não-homogêneos e não-isotérmicos em relação ao método LBL caíram para menos de 20% nas regiões quentes. Denison e Webb também criaram correlações para a função distribuição ALB baseadas nas curvas obtidas sobre os espectros gerados pelo banco de dados HITRAN. As correlações foram desenvolvidas tanto para as moléculas de H₂O [Denison e Webb, 1993b] quanto para as de CO₂ [Denison e Webb, 1994], tornando a aplicação da função ao método SLW mais simples e as soluções mais rápidas. Denison e Webb, 1995, mostraram que é possível aplicar a ideia do método SLW juntamente com a

função distribuição ALB em situações envolvendo mistura de gases, principalmente nas misturas envolvendo o vapor d'água com o dióxido de carbono, que são os principais gases resultantes da combustão de hidrocarbonetos. Solovjov e Webb, 2000, desenvolveram novas técnicas de aplicação do método SLW em misturas de gases, mas neste trabalho não foram usadas as correlações desenvolvidas por Denison e Webb, 1993b, e por Denison e Webb, 1994, pois a função distribuição ALB foi recalculada usando o banco de dados HITEMP. Nesse artigo, também foram apresentadas aproximações para facilitar o uso do método em mistura de gases. Dentre as aproximações apresentadas, estão a da convolução, a da superposição, a da multiplicação e uma aproximação híbrida, que relaciona a aproximação por multiplicação e a por superposição. A aproximação por convolução aplica o teorema da convolução ao método SLW onde a aproximação é baseada na hipótese de que a razão das densidades molares das misturas é constante no espaço. A aproximação por superposição considera que a função distribuição ALB pode ser calculada separadamente para cada gás da mistura e, em seguida, somam-se todos os resultados para encontrar uma função equivalente. A aproximação por multiplicação usa uma ideia parecida com o método da superposição, onde a função distribuição ALB é calculada separadamente para cada gás, e a função equivalente é encontrada através da multiplicação de todas as funções. Maurense et al., 2007, usaram o modelo SLW para descrever o coeficiente de absorção dos gases e resolveram a equação do transporte radiante com o método Monte Carlo. Este método é indicado para resolver problemas em geometrias complexas de maneira mais simples que os métodos convencionais. Por outro lado, em casos onde a geometria é simples, o tempo computacional é maior que o gasto pelos demais métodos de solução. Maurense et al., 2008, aplicaram o modelo SLW para calcular o fluxo radiante em uma câmara de combustão cilíndrica usando as distribuições de temperatura e de concentração obtidas por da Silva et al., 2007, e compararam os resultados com os obtidos pelo modelo WSGG. As comparações mostraram diferenças de até 20% no fluxo de calor radiante calculado entre os dois modelos.

Solovjov e Webb, 2002, desenvolveram o modelo do número de onda cumulativo (CW), que resolve a equação do transporte radiante em meios uniformes e não-uniformes. O modelo é baseado em uma função gerada quando uma seção transversal constante corta o espectro. Nos pontos em que o espectro é menor que essa seção transversal, o modelo gera uma reta crescente e, nos pontos em que o espectro é maior que essa seção transversal, o modelo gera uma reta constante. Assim é gerada uma função não decrescente. Solovjov e Webb, 2005, formalizaram a definição matemática da função CW, e estenderam à aplicação do modelo a meios com mistura de gases e ainda o aplicaram a casos envolvendo fuligem.

Dentre os modelos de gases disponíveis, o CW é o que apresenta os menores desvios em relação ao divergente do fluxo radiante quando comparado a resultados “benchmark”, mas o modelo mostra-se sensível ao estado termodinâmico escolhido como referência, e não satisfaz o balanço de energia nos casos não-isotérmicos ou não-homogêneos. Solovjov e Webb, 2008, aplicaram os modelos SLW e CW utilizando uma aproximação multicamada para problemas não-isotérmicos, dividindo a distribuição de temperatura em partes isotérmicas. Os resultados convergiram com o uso de aproximadamente 20 camadas. Com essa metodologia, o esforço computacional é reduzido uma vez que, dentro de cada camada, o estado termodinâmico é considerado constante. Kamal et al., 2005, estendeu a aplicação do método CW em cavidades bidimensionais, onde o divergente do fluxo radiante foi calculado em meios não-isotérmicos e não-homogêneos, e foram usadas paredes cinzas como condição de contorno. Salinas, 2008, simplificou o modelo CW, tornando o processo menos dispendioso. A técnica desenvolvida reduziu significativamente o tempo computacional, pois usa uma média dos valores obtidos ao longo do número de onda. Esta técnica produz resultados não tão bons quanto o modelo CW, mas o tempo computacional e o uso de memória são significativamente menores. Por outro lado, esta técnica diverge em certos casos, problema que não é observado no modelo CW. Galarça et al., 2011, verificaram que o modelo CW possui uma inconsistência na formulação, pois o balanço de energia não é atendido. Além disso, o método não prediz o fluxo radiante com a mesma exatidão que o divergente do fluxo é estimado. Dessa forma, foi proposta uma correção para essas deficiências do método. A correção consiste em um processo iterativo que corrige o cálculo do fluxo de calor e ao mesmo tempo não altera significativamente o cálculo do divergente do fluxo. Assim o balanço de energia é satisfeito, tornando o método conservativo. Esse processo iterativo deixa o modelo CW mais lento, e a nova técnica é indicada para casos em que se necessita calcular tanto o divergente do fluxo quanto o fluxo de calor no meio. Modest e Zhang, 2002, criaram o método FSK, que usa as hipóteses do k -correlacionado e da distribuição- k . Esse método mostrou-se o melhor entre todos os modelos existentes para casos homogêneos e isotérmicos. Wang e Modest, 2006, aplicaram o método FSK com o método Monte Carlo, mostrando que, em aplicações tridimensionais, a técnica pode reduzir o uso de memória e o tempo computacional. Mossi et al., 2010, calcularam o divergente do fluxo radiante em uma câmara de combustão cilíndrica axissimétrica, considerando um campo de temperaturas não-isotérmico, e uma mistura não-homogênea composta por CO, CO₂, H₂O e fuligem. Os resultados para o divergente do fluxo radiante foram confrontados com quatro diferentes modelos de radiação: o modelo do gás cinza, o modelo WSGG, o modelo SLW e o modelo CW. Os resultados mostraram que

mesmo em meios opticamente finos, há diferenças de mais de 30% entre os modelos usados no cálculo do divergente do fluxo de calor por radiação.

Em muitas simulações que envolvem a combustão, a radiação térmica não é considerada no processo, como em Zhou et al., 2002, que simularam a formação de NO_x em processos turbulentos de combustão do metano com o ar, utilizando o modelo de reações químicas USM, o qual leva em consideração as flutuações da temperatura e das espécies químicas na equação de Arrhenius. Nesse trabalho foram consideradas as equações de Navier-Stokes, o modelo de turbulência $k-\varepsilon$, as equações de conservação de energia e das espécies químicas.

Na maioria dos trabalhos publicados, a radiação térmica é considerada através do modelo de gás cinza, como em Zhou et al., 2003, que simularam a combustão do carvão, onde foi usado o modelo USM para a combustão, um modelo a duas equações para a devolatilização do carvão. O modelo de turbulência de duas fases $k-\varepsilon-k_p$ e o método dos seis fluxos para resolver a equação do transporte radiante também foram incluídos no trabalho. Ainda foram resolvidas as equações da continuidade, da quantidade de movimento e da energia. Zhang et al., 1998, simularam a produção de fuligem em uma câmara de combustão cilíndrica, onde a radiação térmica foi contabilizada com a utilização do modelo do gás cinza e o método das ordenadas discretas para a solução da equação do transporte radiante. Barve et al., 2007, avaliaram a produção da fuligem em chamas laminares usando um modelo simplificado a duas equações e, neste caso, também foi considerado um gás cinza no processo de radiação térmica. Os resultados mostraram que o modelo usado na formação da fuligem não foi capaz de prever com exatidão o fenômeno, e que esta questão ainda é um desafio para os pesquisadores. Ma et al., 2009, simularam a queima de biomassa e carvão em fornalhas usando o software “Fluent”. A geometria foi discretizada com 300.000 volumes e as simulações mostraram que é possível prever o comportamento da queima de biomassa com carvão. Nesse recente trabalho também foi considerado um gás cinza na modelagem da radiação térmica.

Silva et al., 2007, fizeram uma simulação numérica da combustão do metano com o ar em uma câmara cilíndrica. No trabalho, foi empregado o método dos volumes finitos para resolver as equações da conservação de massa, da quantidade de movimento, da energia e das principais espécies químicas envolvidas no processo de combustão. Os efeitos da turbulência foram avaliados com o método $k-\varepsilon$, e a radiação térmica foi resolvida pelo método das zonas, sendo que o gás foi modelado pela soma ponderada de gases cinzas. Os resultados indicaram que o maior efeito da radiação térmica foi percebido na taxa total de transferência de calor. As

trocas radiantes causaram uma homogeneização maior no campo de temperaturas dentro da câmara cilíndrica, 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, chegou a mais de 150 K em alguns casos. Na maior parte da câmara cilíndrica, as trocas de calor por radiação foram mais importantes que as por convecção. Por outro lado, os efeitos da radiação térmica nas reações químicas não foram significativos. Borjini et al., 2007, simulou a transferência de calor em uma caldeira industrial contendo uma mistura de CO₂ e H₂O com campos de temperatura não uniformes. As simulações foram feitas considerando uma geometria tri-dimensional. O coeficiente de absorção dos gases foi modelado pelo método WSGG e a fuligem foi considerada no processo de transferência de calor. O método dos elementos finitos foi utilizado nas simulações e os resultados mostraram que a consideração da fuligem aumentou consideravelmente a transferência de calor por radiação na caldeira. Kaplan et al., 1996, realizaram simulações numéricas transientes e em duas dimensões para estimar a produção de fuligem em escoamentos reativos. Nas simulações, foi usado um modelo para a produção de fuligem e a radiação foi tratada como um meio opticamente fino. Comparações qualitativas e quantitativas entre os experimentos e as simulações mostraram boa concordância para a altura e o formato da chama, exceto na região de saída do gás. Klason et al., 2007, fizeram um estudo sobre o processo de transferência de calor por radiação na queima de biomassa em fornalhas. Neste trabalho, o termo fonte radiante foi calculado de diferentes maneiras. Primeiramente, através do mais simples dos modelos existentes, chamado de modelo opticamente fino, onde é feita uma aproximação do divergente do fluxo radiante sem que a equação do transporte radiante seja resolvida. Nesse modelo, é negligenciada toda a parcela por absorção do gás. Também foi usado o modelo do gás cinza, a aproximação P₁ e o modelo SLW. Além disso, foi empregado o método dos volumes finitos para a resolução da equação da conservação de massa, das equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds, da equação da energia, da equação do transporte das espécies e do modelo de turbulência $k-\epsilon$. Os resultados da taxa de transferência de calor por radiação simulado com a aproximação P₁ mostraram-se muito diferentes dos resultados apresentados pelo modelo do gás cinza e pelo modelo SLW, mas o tempo computacional da aproximação P₁ é aproximadamente 75% inferior aos demais.

No presente trabalho, são considerados os efeitos da radiação térmica emitidos pelos gases participantes e pela fuligem. Mas a transferência de calor por radiação emitida pela fuligem tende a ser dominante, sendo que a partir de certas concentrações, as emissões pelos gases não possuem um papel importante. Dessa forma, uma boa modelagem da formação de

fuligem no processo é crucial para que se obtenham boas aproximações das trocas de calor por radiação. Dentre os efeitos que influenciam na produção de fuligem, estão a concentração de oxigênio e o tempo de residência. Estudos feitos por Hura e Glassman, 1988, e Pels Leusden e Peters, 2000, mostraram em diferentes chamas que, à medida que se aumentam os níveis de oxigênio na chama, a produção de fuligem diminui. Isso acontece porque o oxigênio age como um diluente e ainda reduz as temperaturas locais, e ainda é um oxidante para a fuligem. Outro fator importante para determinar a quantidade de fuligem formada em uma chama é o tempo de residência. Vandsburger et al., 1984, observaram que as concentrações de fuligem em chamas difusas de etileno-ar reduzem com a redução dos tempos de residência. Similarmente Beltrame et al., 2001, observaram que as concentrações de fuligem reduzem com um aumento global das taxas de deformação em chamas de metano-ar. É pertinente ressaltar que o tempo de residência e as taxas de deformação global são inversamente proporcionais. Sendo assim, modelar a formação de fuligem em chamas é uma tarefa complexa, pois é um processo sensível a vários parâmetros como temperatura, tipo de combustível usado na queima, quantidade de oxigênio, tempo de residência, cinética química, entre outros. Dentre os usados, está o modelo empírico proposto por Syed et al., 1990, para chamas de metano. Este modelo considera que a fuligem é formada diretamente do combustível. Em geral, esses modelos não apresentam resultados tão bons quanto os apresentados por Leung et al., 1991, e Fairweather et al., 1992, que são baseados na quebra das moléculas de acetileno em fuligem e hidrogênio. Um mecanismo mais detalhado foi proposto por Wang e Frenklach, 1997, que considera a formação e o crescimento de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos. Este mecanismo é resolvido para 99 espécies, e envolvem 527 reações. O mecanismo apresenta bons resultados em simulações unidimensionais com chamas laminares. D'Anna et al., 2000, e D'Anna et al., 2001, desenvolveram outro mecanismo, que consiste em 90 espécies e 340 reações para modelar a fuligem. Esses mecanismos mostraram-se eficientes em simulações unidimensionais, mas exigiriam um esforço computacional muito elevado para cálculos em duas ou três dimensões.

No decorrer do texto, outras citações relevantes serão feitas à medida que os métodos utilizados no trabalho forem descritos.

Nesse trabalho, primeiramente é feita uma análise do efeito de quatro modelos de radiação térmica (gás cinza, soma ponderada de gases cinzas, SLW e CW) em situações bi-dimensionais, considerando campos de temperatura e concentrações não-uniformes que foram obtidos a partir de simulações que envolveram a combustão de metano em câmaras cilíndricas. As distribuições de temperatura e concentrações dos gases utilizadas possuem

altos gradientes, situações que são comuns em problemas de combustão. Assim, é possível analisar a convergência dos modelos de radiação em situações extremas, bem como analisar a diferença do divergente do fluxo de calor por radiação obtido com os diferentes modelos. Em um segundo momento, os quatro modelos estudados são acoplados ao problema de combustão, de modo que o divergente do fluxo radiante seja considerado em todas as iterações do problema, desde a ignição, até que seja atingido um regime permanente. Então os diferentes resultados são confrontados, para que se faça uma análise do impacto que a modelagem da radiação térmica causa no campo de temperaturas e na formação dos gases resultantes do processo de combustão, prática que comumente é negligenciada pelos pesquisadores, pois a modelagem da radiação térmica conduz a um esforço computacional muito maior nas simulações.

1.3 Organização da tese

O capítulo 2 apresenta as equações governantes do processo de combustão em chamas laminares. São apresentadas a equação da conservação de energia, as equações da quantidade de movimento, a equação da conservação das espécies químicas envolvidas no processo da queima de metano, a equação da energia em termos de entalpia, e um modelo a duas equações para a formação de fuligem. No capítulo 3, é discutida a equação do transporte radiante, usada para calcular o divergente do fluxo radiante, que aparece como um termo fonte na equação da energia. Para que seja resolvida essa equação, é necessário modelar o coeficiente de absorção dos gases resultantes do processo de combustão. Assim, no capítulo 4 são apresentados os principais modelos usados na literatura para a modelagem do coeficiente de absorção. São discutidos os detalhes usados no modelo do gás cinza, no modelo da soma ponderada de gases cinzas, no modelo SLW e no modelo CW. O capítulo 5 apresenta os métodos numéricos utilizados para resolver as equações apresentadas nos capítulos 2 e 3. Entre eles, estão o método dos volumes finitos e o método das ordenadas discretas. No capítulo 6 são feitas comparações entre os modelos de radiação apresentados no capítulo 4, e validações das rotinas usadas para o cálculo do divergente do fluxo de calor por radiação. Nas comparações, são usados casos unidimensionais e bidimensionais. O capítulo 7 apresenta a geometria utilizada nas simulações, os detalhes sobre malha, a paralelização usada para diminuir o tempo computacional, a validação das rotinas programadas e os resultados obtidos na queima de metano com ar em chamas laminares. Também nesse capítulo é feita uma análise dos efeitos das trocas de calor radiante nesse processo de combustão estudado e é analisado o

efeito causado pelos diferentes modelos de gases usados na modelagem na radiação no problema de combustão e, finalmente, nos capítulos 8 e 9 são apresentadas as conclusões dos efeitos causados pela modelagem da radiação térmica nas simulações de combustão de metano em ar e as sugestões para trabalhos futuros.

O apêndice A apresenta uma tabela com todas as reações químicas utilizadas no processo enquanto que no apêndice B é mostrada a diferença entre os bancos de dados espectrais HITRAN e HITEMP, que são usados para determinar o coeficiente de absorção dos gases.

2 EQUAÇÕES GOVERNANTES DO PROCESSO DE COMBUSTÃO DE CHAMAS LAMINARES EM CÂMARAS CILÍNDRICAS

Este capítulo aborda as equações governantes do processo de combustão em chamas laminares, considerando coordenadas cilíndricas axissimétricas.

2.1 Equação da conservação de massa

A equação da continuidade para escoamentos laminares, em coordenadas cilíndricas axissimétricas, é descrita por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho r v)}{\partial r} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial z} = 0 \quad (2.1)$$

onde ρ é a massa específica, u e v são as componentes da velocidade nas direções radial r e axial z , respectivamente.

2.2 Equações da quantidade de movimento

As equações da quantidade de movimento nas direções axial e radial são descritas por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u u)}{\partial z} + \frac{\partial(\rho v u)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) - \frac{\rho u v}{r} + \frac{\mu}{r} \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{\partial P}{\partial z} + (\rho_o - \rho) g + \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{\mu}{r} \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{2}{3} \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{v}{r} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial z} + \frac{\partial(\rho v v)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{\rho v v}{r} + \frac{\mu}{r} \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{\partial P}{\partial r} + \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) - 2\mu \frac{v}{r^2} - \frac{2}{3} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{v}{r} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde μ é a viscosidade, P a pressão e g é a gravidade.

2.3 Equação da conservação das espécies

A equação da conservação das espécies é resolvida para todas as espécies, menos para o nitrogênio, que se mantém inerte durante as reações químicas. A equação é descrita por:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u Y_i)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho r v Y_i)}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\rho r D_i \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial z} \right) + \dot{r}_i \quad (2.4)$$

no lado esquerdo da igualdade tem-se o termo transiente e os termos convectivos, onde Y_i representa a fração mássica da espécie i , u e v são as componentes do campo de velocidade e ρ é a massa específica. No lado direito da igualdade têm-se os termos difusos, onde D_i é o coeficiente de difusão da espécie i , calculado por:

$$D_i = \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{1}{Le_i} \quad (2.5)$$

onde λ é a difusividade térmica, c_p é o calor específico e Le_i é o número de Lewis para a espécie i .

E finalmente o termo fonte \dot{r}_i da Equação 2.4 é a taxa volumétrica de formação ou destruição de uma espécie química. Este termo contém informações de todas as reações, isto é:

$$\dot{r}_i = W_i \sum_{k=1}^n (v_{ik}'' - v_{ik}') w_k \quad (2.6)$$

onde W_i é o peso molecular da espécie i , v_{ik}' e v_{ik}'' são os coeficientes estequiométricos da reação elementar para a i -ésima espécie e a k -ésima reação e w_k é a taxa da k -ésima reação, dada por:

$$w_k = k_{fk} \prod_{i=1}^n \left(\frac{\rho Y_i}{W_i} \right)^{v_{ik}'} - k_{bk} \prod_{i=1}^n \left(\frac{\rho Y_i}{W_i} \right)^{v_{ik}''} \quad (2.7)$$

e os coeficientes k_{fk} e k_{bk} são escritos na forma:

$$k_k = A_k T^{n_k} \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right) \quad (2.8)$$

onde A_k é o fator de frequência, n_k é um expoente para a temperatura e E_k é a energia de ativação da reação k .

Neste trabalho, o termo fonte \dot{r}_i é calculado baseado em um mecanismo proposto por Peters, 1993, que usa 33 espécies e 112 taxas de reações. No apêndice A é listado as reações e os coeficientes usados. Este detalhado mecanismo químico permite analisar os efeitos das reações, especialmente a produção da fuligem a partir do C_2H_2 e de outras espécies como O e OH, que são importantes no processo de oxidação da fuligem.

2.4 Formação de fuligem

A fuligem é definida como partículas de carbono que se formam durante o processo da queima de combustível. Essas partículas de carbono são agregados esféricos que se juntam e formam um aglomerado, como uma estrutura, que é resultante do processo de pirólise do combustível. A pirólise do combustível resulta em hidrocarbonetos aromáticos policíclicos, que aumentam de tamanho devido à presença de acetileno entre outros precursores da fuligem. Eventualmente as estruturas aromáticas crescem suficientemente para se desenvolver em uma partícula nucleada. Este é o processo de nucleação da fuligem, que ocorre em temperaturas em torno de 1600 K. As partículas nucleadas de fuligem também contêm hidrogênio, o qual é removido nessas altas temperaturas, enquanto que ao mesmo tempo as partículas de fuligem absorvem fisicamente e quimicamente os hidrocarbonetos gasosos. Este é o processo de crescimento da fuligem, que conduz a um grande aumento na massa. Simultaneamente as partículas são oxidadas formando alguns gases, e este processo cessa em temperaturas inferiores a 1300 K.

Os processos de formação da fuligem são afetados pela geometria da chama. Takahashi e Glassman, 1984, mostraram que em chamas pré-misturadas a estrutura do combustível não interfere no processo de formação de fuligem. Hura e Glassman, 1988, fizeram experimentos para medir a formação da fuligem em chamas difusas, variando a quantidade de oxigênio no processo. Eles observaram que a presença de uma pequena quantidade de oxigênio aumenta a concentração de fuligem, enquanto que um aumento na quantidade de oxigênio resulta em uma diminuição na concentração da fuligem, diminuindo

até próximo de zero para condições estequiométricas. Mitrovic e Lee, 1998, fizeram observações similares em chamas laminares e pré-misturadas de acetileno.

A modelagem da fuligem é uma tarefa complexa, devido ao problema envolver um processo termoquímico acoplado. Simplificações são freqüentemente feitas para descrever o crescimento da fuligem em escoamentos complexos, pois o esforço computacional é elevado para resolver o fenômeno. Neste trabalho, é usado um modelo simplificado de duas equações para modelar a fuligem [Leung et al., 1991; Fairweather et al., 1992]. Este modelo tem sido usado extensivamente para modelar a formação da fuligem em chamas difusas [Liu et al., 2006; Guo et al., 2002; Zhang e Ezekoye, 1998; Kennedy et al., 1996]. Este é um modelo semi-empírico, onde são resolvidas as equações da conservação da fração mássica da fuligem do número de densidade da fuligem. A fuligem é modelada levando-se em consideração a formação e o crescimento superficial somente a partir do acetileno (C_2H_2). As equações usadas na modelagem são descritas a seguir:

$$\frac{\partial(\rho Y_s)}{\partial t} + (v + v_{th}) \frac{\partial(\rho Y_s)}{\partial r} + (u + u_{th}) \frac{\partial(\rho Y_s)}{\partial z} = \dot{r} \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial N_s}{\partial t} + (v + v_{th}) \frac{\partial N_s}{\partial r} + (u + u_{th}) \frac{\partial N_s}{\partial z} = \dot{r}_N \quad (2.10)$$

Nas equações acima, os termos difusivos são negligenciados, pois a fuligem é tratada como uma partícula e o número de Schmidt é da ordem de 10^3 [Ezekoye e Zhang, 1997]. Os termos u_{th} e v_{th} são as velocidades termoporéticas nas direções axial e radial respectivamente, e são modeladas pelas seguintes equações [Talbot et al., 1980].

$$u_{th} = -0,55 \frac{\mu}{\rho T} \frac{dT}{dz} \quad \text{e} \quad v_{th} = -0,55 \frac{\mu}{\rho T} \frac{dT}{dr} \quad (2.11)$$

\dot{r} é o termo fonte da equação da fração mássica e \dot{r}_N o termo fonte da equação do número de densidade da fuligem.

Para modelar \dot{r} , foi feito uma aproximação semelhante à aplicada por Guo et al., 2002, e foi acrescentada ao modelo a oxidação da fuligem a partir do O_2 , OH e O . As reações consideradas são descritas na Tabela 2.1. Baseado nas reações apresentadas na Tabela 2.1, o termo fonte \dot{r} é calculado pela Equação 2.12.

Tabela 2.1 – Reações usadas na modelagem da fuligem

N	Reação	A	n	E (cal/mole)	Ref.
1	$C_2H_2 \rightarrow 2C(s) + H_2$	$1,35 \times 10^6$	0	41000	a*
2	$C_2H_2 + nC(s) \rightarrow (n+2)C(s) + H_2$	5×10^2	0	24000	a*
3	$C(s) + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO$	$1,78 \times 10^4$	0,5	39000	a*
4	$C(s) + OH \rightarrow CO + H$	$1,06 \times 10^2$	-0,5	0	b*
5	$C(s) + O \rightarrow CO$	$5,54 \times 10^{10}$	-0,5	0	c*

a*: Fairweather et al., 1992; b*: Moss et al., 1995; e c*: Bradley et al., 1984.

$$\dot{r} = M_{C(s)} (\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4 - \omega_5) \quad (2.12)$$

onde

$$\begin{aligned} \omega_1 &= k_1(T) [C_2H_2] \\ \omega_2 &= k_2(T) A_s [C_2H_2] \\ \omega_3 &= k_3(T) A_s [O_2] \\ \omega_4 &= \phi_{OH} k_4(T) A_s [OH] \\ \omega_5 &= \phi_O k_5(T) A_s [O] \end{aligned} \quad (2.13)$$

onde $M_{C(s)}$ é o peso molecular do carbono ($M_{C(s)} = 12,011$ kg/kmol) e A_s é a área superficial da fuligem por unidade de volume, calculada pela seguinte equação:

$$A_s = \pi (d_p^2) (\rho N) = \pi \left(\frac{6}{\pi} \frac{1}{\rho_{C(s)}} \frac{Y_s}{N} \right)^{2/3} (\rho N) \quad (2.14)$$

onde d_p é o diâmetro médio da partícula, ϕ_O é o fator de eficiência de colisão do ataque da espécie O sobre as partículas de carbono. O valor considerado nesse trabalho é $\phi_O = 0,5$ [Bradley et al., 1984]. ϕ_{OH} é o fator de eficiência de colisão do ataque de OH sobre as partículas de carbono. Seu valor é calculado usando o método sugerido por Kennedy et al., 1996, onde o valor de ϕ_{OH} varia linearmente entre 0,05 e 0,2, em função do raio normalizado pelo diâmetro (r/D). Para valores onde r/D é maior que 7, foi considerado $\phi_{OH} = 0,2$.

O termo fonte da Equação 2.10 é calculado como:

$$\dot{r}_N = \frac{2}{C_{\min}} N_A \omega_1 - 2C_a \left(\frac{6M_{C(s)}}{\pi\rho_{C(s)}} \right)^{1/6} \left(\frac{6\kappa T}{\rho_{C(s)}} \right)^{1/2} [C(s)]^{1/6} [\rho N]^{11/6} \quad (2.15)$$

O primeiro termo do lado direito representa a nucleação para a equação do número de partícula enquanto o segundo termo representa a aglomeração das partículas. N_A é o número de Avogrado ($6,022 \times 10^{26}$ molec./kmol), C_{\min} é o número de átomos de carbono no incipiente (90000), κ é a constante de Boltzmann ($1,38 \times 10^{-23}$ J/K), C_a é a taxa de aglomeração ($C_a = 3$) e $\rho_{C(s)}$ é a massa específica da fuligem (2000 kg/m^3).

O processo de aglomeração descrito acima assume que as partículas de fuligem são esféricas e que a aglomeração das mesmas conduz a aglomerados esféricos, o que resulta em uma redução da área superficial por unidade de volume. Por outro lado, o processo de aglomeração na ausência de nucleação, crescimento e oxidação superficial, conduz a uma área superficial constante. Dessa forma, o processo de aglomeração não prediz a área superficial total, dessa forma as reações baseadas na área superficial são afetadas.

2.5 A equação da energia

A equação da energia é resolvida em termos de entalpia usando uma formulação implícita. A entalpia total é expressa em função da temperatura e inclui a entalpia de formação das espécies. As curvas polinomiais para a entalpia e o calor específico que são usadas nesse trabalho foram obtidas em NIST-JANAF, 1998.

Para escoamentos reativos em regime laminar e incompressível, a equação da energia em termos de entalpia tem a forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u h)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho v h)}{\partial r} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial h}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{k}{c_p} \frac{\partial h}{\partial r} \right) + \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \sum_i h_i \left(\rho D_i - \frac{k}{c_p} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right) &+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_i h_i \left(\rho D_i - \frac{k}{c_p} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial z} \right) - \nabla \cdot \bar{q}_R \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde a entalpia total h é calculada pelo somatório das entalpias de cada espécie, de acordo com a seguinte equação:

$$h = \sum_i Y_i h_i \quad (2.17)$$

onde

$$h_i = h_{i,ref} + \int_{T_{ref}}^T c_{pi}(T) dT \quad (2.18)$$

e o calor específico é obtido pela relação

$$c_p = \sum_i c_{pi} Y_i \quad (2.19)$$

considerando cada espécie i .

O divergente do fluxo radiante, último termo do lado direito da Equação 2.16, é o principal objeto de estudo desse trabalho, e será discutido em detalhes no próximo capítulo.

2.6 Propriedades termofísicas

Uma vez que as frações mássicas de cada espécie e a temperatura são conhecidas, a massa específica de cada volume é calculada usando a seguinte equação de estado:

$$\rho = \frac{P}{RT \left(\sum_i Y_i \right)} \quad (2.20)$$

onde $P = 1,0133 \times 10^5$ Pa e $R = 8,314$ kJ/kmol K.

A viscosidade de cada espécie é calculada usando a expressão [Bird et al., 2002]:

$$\mu_i = 2,6693 \times 10^{-5} \frac{\sqrt{M_i T}}{\sigma^2 \Omega_{i,\mu}} \quad (2.21)$$

onde $\Omega_{i,\mu}$ é a integral de colisão para a viscosidade, a qual é uma função da temperatura adimensional kT/ε , σ é o diâmetro médio de colisão das moléculas e ε é a máxima energia característica de atração entre duas moléculas.

A viscosidade da mistura é calculada pela seguinte relação [Bird et al., 2002]:

$$\mu_{mix} = \sum_{i=1}^N \frac{x_i \mu_i}{\sum_j x_j \Phi_{ij}} \quad (2.22)$$

onde Φ_{ij} é calculado por:

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right] \quad (2.23)$$

A condutividade térmica de cada espécie é calculada pela seguinte expressão [Bird et al., 2002]:

$$k_i = 0,832221 \frac{\sqrt{M_i T}}{\sigma^2 \Omega_{i,\mu}} \quad (2.24)$$

e a condutividade térmica da mistura é:

$$k_{mix} = \sum_{i=1}^N \frac{x_i k_i}{x_j \Phi_{ij}} \quad (2.25)$$

O coeficiente de difusão binário da espécie i com respeito a espécie j é obtido pela relação:

$$D_{ij} = 0,0018583 \sqrt{T^3 \left(\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right)} \frac{1}{p \sigma_{ij}^2 \Omega_{D,ij}} \quad (2.26)$$

onde D_{ij} está em cm^2/s , T é a temperatura em K, p é a pressão em atm e σ_{ij} está em Å. As quantidades adimensionais $\Omega_{D,ij}$ é a integral de colisão e varia com a temperatura

adimensional $\kappa T/\varepsilon_{ij}$. Essas integrais de colisão são calculadas usando ajustes polinomiais baseados nas temperaturas adimensionais. κ é a constante de Boltzmann e T é a temperatura em K. Os parâmetros σ_{ij} e ε_{ij} são obtidos pelas seguintes relações [Bird et al., 2002]:

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_j) \text{ e } \varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j} \quad (2.27)$$

E o coeficiente de difusão em uma mistura é calculado pela equação:

$$D_{i,mix} = \frac{1 - x_i}{\sum_{j, j \neq i} x_j / D_{ij}} \quad (2.28)$$

onde x_i e x_j são as frações molares das espécies i e j respectivamente.

3 RADIAÇÃO TÉRMICA EM MEIOS PARTICIPANTES

O estudo do processo de transferência de calor por radiação térmica em meios participantes (onde os gases e/ou partículas sólidas absorvem, emitem e espalham a radiação), tem recebido atenção especial nos últimos anos devido à sua importante aplicação em fornalhas, fornos de combustão em temperatura e pressão elevadas, explosões nucleares, geradores de plasma para fissão nuclear, transferência de calor em regiões porosas entre outros. Algumas dessas aplicações são relativamente recentes, mas o estudo da radiação em gases vem sendo explorado por mais de cem anos. O conhecimento da emissão e espalhamento da radiação em gases é de fundamental importância em astronomia, pois o espectro observado durante a emissão e absorção da radiação por um gás é característica única de determinado gás, permitindo o diagnóstico do tipo de gás, da temperatura e da concentração. Na indústria, a combustão gera produtos como o vapor d'água e o dióxido de carbono, que são importantes na emissão e na absorção da energia radiante. A energia emitida nas chamas não é proveniente somente de gases, mas também da fuligem (partículas de carbono quente). Em fornos de combustão, a temperatura pode atingir poucos milhares de Kelvin, o que torna o processo de transferência de calor por radiação térmica tão importante quanto os demais mecanismos de transferência de calor. Neste capítulo, são primeiramente definidos os conceitos de intensidade de radiação em um meio que não participa e, em seguida, é estendido o tema para meios que participam do processo de transferência de calor.

3.1 A intensidade de radiação em meios não-participantes

A intensidade de radiação que sai de uma superfície na direção (θ, φ) é definida como a energia que sai por unidade de tempo, por unidade da superfície projetada da área normal na direção (θ, φ) e por unidade do ângulo sólido em torno da direção (θ, φ) . De acordo com essa definição, a intensidade emitida por um corpo negro não varia com a direção. Essa definição é útil para a comparação da intensidade direcional emitida por superfícies reais com a do corpo negro.

Considere a radiação que sai de uma superfície dA_s , e percorre um meio ideal que não absorve, não emite e não espalha, tem propriedades constantes. Além disso, considere que um elemento de área dA_1 está distante S_1 de dA_s e que dA_s e dA_1 são normais a S_1 . Como a intensidade espectral $i_{\eta,1}$ é a taxa de energia que passa em dA_1 por unidade da área projetada

de dA_1 , por unidade de ângulo sólido, por unidade do intervalo do comprimento de onda, a energia de dA_s passando por dA_1 na direção de S_1 é:

$$i_{\eta,1}dA_1d\omega_1d\eta = i_{\eta,1}dA_s \left(dA_s / S_1^2 \right) d\eta \quad (3.1)$$

onde a relação do ângulo sólido

$$d\omega_1 = dA_s / S_1^2 \quad (3.2)$$

foi usada. Supondo que dA_1 é afastado à distância S_2 da fonte ao longo do mesmo caminho, a taxa de energia que passa por dA_1 na nova posição é:

$$i_{\eta,2}dA_1d\omega_2d\eta = i_{\eta,2}dA_s \left(dA_s / S_2^2 \right) d\eta \quad (3.3)$$

Assim, das Equações 3.1 e 3.3, tem-se que a razão da taxa de energia para as distâncias S_1 e S_2 é:

$$\frac{i_{\eta,1}dA_1d\omega_1d\eta}{i_{\eta,2}dA_1d\omega_2d\eta} = \frac{i_{\eta,1}S_2^2}{i_{\eta,2}S_1^2} \quad (3.4)$$

Considerando-se uma fonte diferencial que emite energia igualmente em todas as direções e desenhando duas esferas concêntricas em torno dela, como mostrado na Figura 3.1.

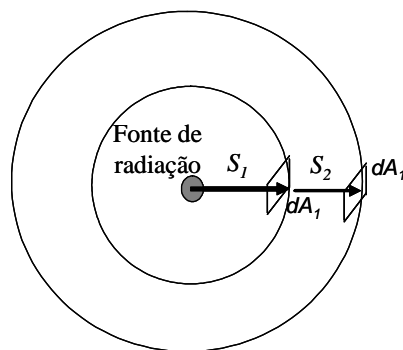


Figura 3.1 – Variação do fluxo de energia distante de uma fonte

Se $dQ_{\eta,s} d\eta$ é toda energia espectral que sai da fonte, o fluxo de energia que atravessa e esfera interna é:

$$dQ_{\eta,s} d\eta / 4\pi S_1^2 \quad (3.5)$$

e o fluxo que atravessa a esfera externa é dado por:

$$dQ_{\eta,s} d\eta / 4\pi S_2^2 \quad (3.6)$$

Assim, a razão da energia que passa pelos dois elementos dA_1 em S_1 e em S_2 é:

$$\frac{(dQ_{\eta,s} d\eta / 4\pi S_1^2) dA_1}{(dQ_{\eta,s} d\eta / 4\pi S_2^2) dA_1} = \frac{S_2^2}{S_1^2} \quad (3.7)$$

das Equações 3.4 e 3.7, conclui-se que:

$$i_{\eta,1} = i_{\eta,2} \quad (3.8)$$

Desse modo, a intensidade em uma dada direção em um meio que não absorve, não emite e não espalha a radiação com propriedades constantes é independente da posição ao longo da direção.

3.2 A intensidade de radiação em meios participantes

A intensidade espectral da radiação i_η incidente na direção normal em um volume de espessura dS que absorve, emite e espalha a radiação depende dos coeficientes de absorção e de espalhamento do gás, conforme será mostrado na sequência.

3.2.1 Equação do Transporte Radiante

A equação do transporte radiante em meios participantes corresponde a uma equação diferencial que descreve a intensidade de radiação ao longo de um caminho em uma direção fixa através de um meio que absorve, emite e/ou espalha radiação.

Considerando-se que a intensidade de radiação $i_\eta(S)$ ao longo de um caminho S em um meio que absorve, emite e/ou espalha radiação, como o representado na Figura 3.2. Assim, tem-se que:

$$di_{\eta,a}(S, \omega) = -\kappa_\eta(S) i_\eta(S, \omega) dS \quad (3.9)$$

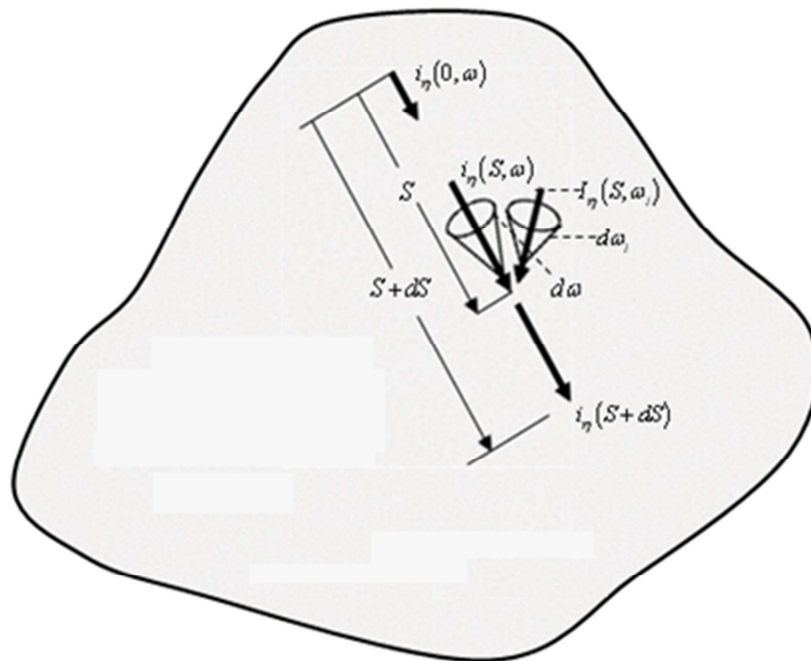


Figura 3.2 – Meio que absorve, emite e espalha radiação

Segundo Modest, 1991, quando um meio está em equilíbrio termodinâmico, a contribuição para a intensidade de radiação na direção S através por emissão, ao longo do caminho dS , é representada por:

$$di_{\eta,e}(S, \omega) = \kappa_\eta(S) i_{\eta b}(S) dS \quad (3.10)$$

A parcela de radiação espalhada em cada direção depende de $\sigma_{s\eta}(\omega_i)i_\eta(S,\omega_i)$ e a distribuição da energia depois do espalhamento é dada pela função de fase $\Phi_\eta(\omega,\omega_i)$, que também pode ser uma função de S . Assim o ganho de i_η na direção de S por espalhamento é dado por:

$$di_{\eta,s}(s,\omega) = -\sigma_{s\eta}(S,\omega)i_\eta(S,\omega)dS + \frac{dS}{4\pi} \int_{\omega_i=0}^{4\pi} \sigma_{sn}(S,\omega_i)i_\eta(S,\omega_i)\Phi_\eta(\omega,\omega_i)d\omega_i \quad (3.11)$$

dessa forma, tem-se que:

$$\begin{aligned} \frac{di_\eta}{dS} = & -\kappa_\eta(S)i_\eta(S) + \kappa_\eta(S)i_{\eta b}(S) - \sigma_{s\eta}(S)i_\eta(S) + \\ & \frac{\sigma_{s\eta}(S)}{4\pi} \int_{\omega_i=0}^{4\pi} i_\eta(S,\omega_i)\Phi_\eta(\omega,\omega_i)d\omega_i \end{aligned} \quad (3.12)$$

Quanto aos termos do lado direito da equação, o primeiro representa perdas por absorção, o segundo representa ganhos por emissão, o terceiro, perdas por espalhamento e, por fim, o quarto representa ganhos por espalhamento na direção S . Assim, a equação do transporte radiante para meios que absorvem, emitem e/ou espalham apresenta a seguinte forma:

$$\frac{di_\eta}{dS} = -(\kappa_\eta(S) + \sigma_{s\eta}(S))i_\eta(S) + \kappa_\eta(S)i_{\eta b}(S) + \frac{\sigma_{s\eta}(S)}{4\pi} \int_{\omega_i=0}^{4\pi} i_\eta(S,\omega_i)\Phi_\eta(\omega,\omega_i)d\omega_i \quad (3.13)$$

Para uma superfície que emite e reflete, a intensidade é independente da direção. Assim, para um ponto \mathbf{r}_w na superfície, a condição de contorno necessária para a solução da equação é:

$$I(\mathbf{r}_w, \hat{s}) = \varepsilon(\mathbf{r}_w)I_b(r_w) - \frac{1 - \varepsilon(\mathbf{r}_w)}{\pi} \int_{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{s}' < 0} I(\mathbf{r}_w, \hat{s}') |\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{s}'| d\Omega' \quad (3.14)$$

3.2.2 O coeficiente de espalhamento

Segundo Siegel e Howell, 2002, o espalhamento pode ser visto em termos de seções transversais de espalhamento espectral s_η , a qual depende de η , do tamanho da partícula, da polarização etc. A taxa de espalhamento espectral s_η em relação à área geométrica projetada de uma partícula normal para o caminho incidente é o fator de eficiência do espalhamento, $Q_{s\eta}$.

O espalhamento em uma seção transversal pode ser determinado experimentalmente, medindo a parcela de radiação em um feixe que penetra através de uma nuvem de partículas espalhadas. A dificuldade está em distinguir a radiação espalhada na direção principal, da radiação emitida. A Figura 3.3 mostra um feixe incidente em um pequeno ângulo de divergência, a direção principal de radiação transmitida tem somente um pequeno ângulo sólido e assim a radiação espalhada proveniente das outras direções é pequena.

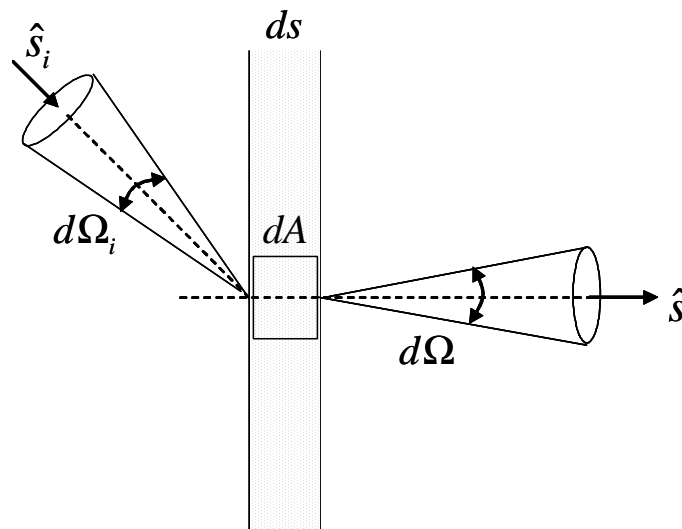


Figura 3.3 – Redirecionamento da intensidade radiante por espalhamento

Dessa forma, a parcela espalhada $di_{\eta,s}$ da intensidade incidente, dividida pela intensidade i_η do feixe incidente, é igual à área aparente de espalhamento projetado $d^2A_{s\eta}$ de todas as partículas espalhadas que são encontradas, dividido pela área da seção transversal do feixe incidente dA , isto é:

$$\frac{di_{\eta,s}}{i_{\eta}} = \frac{d^2 A_{s\eta}}{dA} \quad (3.15)$$

assim, o coeficiente de espalhamento $\sigma_{s\eta}$ é definido como:

$$\sigma_{s\eta} = \int_{N(R)=0}^{\infty} s_{\eta}(R) dN(R) \quad (3.16)$$

onde $dN(R)$ é o número de partículas por unidade de volume na faixa de raio que vai de R até $R+dR$, e $s_{\eta}(R)$ é a seção transversal de espalhamento de uma partícula de raio R .

3.2.3 O coeficiente de absorção

As propriedades radiantes em paredes opacas são descritas com boa precisão por modelos simples, nos quais a emissão, a absorção e a reflexão são consideradas cinzas e difusas. Por outro lado, as propriedades moleculares dos gases variam forte e rapidamente com o número de onda de tal forma que a hipótese de gás cinza não apresenta boa precisão [Edwards, 1976]. Com isso, deve ser levado em conta a dependência do coeficiente de absorção dos gases com o número de onda, especialmente para temperaturas maiores que 1000 K, onde esse comportamento é definido pelo espectro de absorção dos gases.

Para o cálculo dos espectros de absorção dos gases, existem expressões que são usadas para determinar o alargamento das linhas, que são discutidas a seguir:

3.2.4 Alargamento Natural

O alargamento natural da linha é calculado pela seguinte expressão:

$$\frac{\kappa_{\eta,ij}(\eta)}{S_{ij}} = \frac{\gamma_n / \pi}{\gamma_n^2 + (\eta - \eta_{ij})^2} \quad (3.17)$$

onde γ_{η} é a meia largura para o alargamento natural, S_{ij} é a intensidade da linha e η é o número de onda. Este alargamento é conhecido como perfil de Lorentz. Em unidades de número de onda, o perfil gerado é simétrico ao redor de η_{ij} . Para aplicações em engenharia, a meia

largura para o alargamento natural é muito pequena comparada com outros mecanismos de alargamento de linha, assim o alargamento natural é usualmente negligenciado.

3.2.5 Alargamento Doppler

O alargamento Doppler da linha é calculado pela seguinte expressão, baseada na distribuição gaussiana:

$$\frac{\kappa_{\eta,ij}(\eta)}{S_{ij}} = \frac{1}{\gamma_D} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \exp\left[-(\eta - \eta_{ij})^2 \frac{\ln 2}{\gamma_D^2}\right] \quad (3.18)$$

onde γ_D é a meia largura para o alargamento Doppler, calculada pela seguinte relação:

$$\gamma_D = \frac{\eta_{ij}}{c} \left(\frac{2kT}{M} \ln 2 \right)^{1/2} \quad (3.19)$$

γ_D é diretamente proporcional a $T^{1/2}$, assim o alargamento Doppler torna-se importante em altas temperaturas.

3.2.6 Alargamento por Colisão

Quando a pressão do gás aumenta, a taxa de colisão molecular também aumenta, resultando no alargamento por colisão das linhas espectrais. Assim, o alargamento por colisão é calculado pela seguinte expressão, baseada no perfil de Lorentz:

$$\frac{\kappa_{\eta,ij}(\eta)}{S_{ij}} = \frac{\gamma_c / \pi}{\gamma_c^2 + (\eta - \eta_{ij})^2} \quad (3.20)$$

onde a meia largura γ_c é determinada pela taxa de colisão. Um valor aproximado calculado pela teoria cinética é:

$$\gamma_c = \frac{1}{2\pi c} \frac{4\sqrt{\pi} D^2 P}{(MkT)^{1/2}} \quad (3.21)$$

onde D é o diâmetro das moléculas e P é a pressão do gás. A Equação 3.21 mostra que o alargamento por colisão torna-se importante para altas pressões e baixas temperaturas.

3.2.7 Alargamento Stark

Na presença de fortes campos elétricos, as partículas dos gases são fortemente perturbadas. Isto é conhecido como efeito Stark, o qual produz um considerável alargamento nas linhas. Os cálculos do formato das linhas para esse perfil são feitos através de mecanismos quânticos, onde as formas não apresentam simetria e são muito complexas. Mais informações sobre esse perfil pode ser encontrado em Griem H., 1964.

Dentre os alargamentos apresentados, o alargamento por colisão é geralmente o mais importante para situações em engenharia, onde a região de maior importância para a transferência de calor por radiação é a do infravermelho. Segundo Siegel e Howell, 2002, os demais mecanismos de alargamento podem ser negligenciados.

Assim, a equação para a construção do espectro de absorção dos gases, considerando o alargamento por colisão, é feito da seguinte maneira:

$$\kappa_{\eta} = \sum_i \frac{S_i}{\pi} \frac{\gamma_i}{\gamma_i^2 + (\eta - \eta_i)^2} \quad (3.22)$$

onde Denison e Webb, 1993a, verificaram que as linhas na qual a contribuição para κ_{η} são significantes estão na vizinhança em torno de η até 25 cm^{-1} em cada lado. A meia largura γ é calculada levando em conta a pressão e a temperatura, pela seguinte expressão:

$$\gamma = \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^n P_s \gamma_{self} + (1 - P_s) \gamma_{ar} \quad (3.23)$$

onde n é o coeficiente de dependência da temperatura, P_s é a pressão parcial, γ_{self} e γ_{ar} são as meias larguras considerando a colisão das moléculas do gás entre elas mesmas e com as moléculas do ar, respectivamente.

Os valores de S , γ_{ar} , γ_{self} e n são obtidos em banco de dados espectrais, tais como HITRAN (**h**igh-**r**esolution **t**ransmission molecular absorption database), HITEMP (**h**igh-**t**emperature molecular spectroscopic database), CSDS (**C**arbon **d**ioxide spectroscopic database), etc.

O banco de dados HITRAN foi originalmente criado para análises na atmosfera terrestre. Esse banco de dados apresenta os parâmetros medidos a uma temperatura de 296 K para 39 tipos de moléculas, entre elas o H₂O e o CO₂, que são os principais gases resultantes da combustão de hidrocarbonetos. Uma explicação do significado de cada um dos parâmetros é apresentado na Tabela 3.1.

Para estudos de combustão, é mais apropriada a utilização do banco de dados HITEMP, que é análogo ao banco de dados HITRAN, porém os dados foram obtidos em elevadas temperatura (1000 K e 1500 K). Esse banco de dados apresenta os mesmos parâmetros apresentados pelo HITRAN, porém apenas para as moléculas H₂O, CO₂ e CO. Já o banco de dados CSDS, apresenta um banco de dados, no mesmo formato do HITRAN, para as moléculas de CO₂, medidos nas temperaturas de 296 K, 1000 K e 2000 K. As principais diferenças entre os banco de dados HITRAN e HITEMP para o cálculo do coeficiente de absorção são detalhadas no apêndice B.

Tabela 3.1 – Nomenclatura utilizada nos banco de dados HITRAN e HITEMP.

Parâmetro	Descrição
Mol	Número da molécula.
Iso	Número do isótopo.
ν	Número de onda no vácuo, em cm^{-1} .
S	Intensidade, em $\text{cm}^{-1}/(\text{molec} \times \text{cm}^{-2})$.
A	Coeficiente de Einstein, s^{-1} .
γ_{ar}	Alargamento da meia largura pelo ar, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$.
γ_{self}	Alargamento da meia largura, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$.
E''	Energia do estado mais baixo, cm^{-1} .
n	Coeficiente de dependência da temperatura.
δ	Deslocamento da linha por pressão do ar, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$.
ν'	Índice quântico global do estado superior.

v''	Índice quântico global do estado inferior.
Q'	Números quânticos do estado superior.
Q''	Números quânticos do estado inferior.
ierr	Índices de precisão para frequência, intensidade e alargamento pelo ar.
iref	Índices para tabelas de referência correspondentes à frequência, intensidade e meia largura.
*	Marcação para as linhas calculadas com um algoritmo de acoplamento.
g'	Peso estatístico do estado superior.
g''	Peso estatístico do estado inferior.

3.2.8 A função de fase

Considerando a radiação em um ângulo sólido $d\omega_i$ que é incidente sobre uma área dA , a parcela de intensidade espalhada incidente em dS é dada por:

$$di_{\eta,s} = \sigma_{\eta} i_{\eta} dS \quad (3.24)$$

onde $di_{\eta,s}$ é a energia espectral espalhada em um caminho de comprimento dS por unidade de ângulo sólido incidente e da área normal para a direção incidente.

A intensidade espalhada na direção (θ, φ) é definida por:

$$di_{\eta,s}(\theta, \varphi) = \frac{\text{energia espectral espalhada na direção } (\theta, \varphi)}{d\omega_s dA d\omega_i d\eta} \quad (3.25)$$

onde $d\omega_s$ é o ângulo sólido da direção espalhada, dA é a área normal e $d\omega_i$ é o ângulo sólido da radiação incidente.

A função de fase $\Phi(\theta, \varphi)$ descreve a distribuição angular da intensidade do espalhamento. Ela relaciona a magnitude direcional de $di_{\eta,s}(\theta, \varphi)$ em relação a toda intensidade espalhada $di_{\eta,s}$ a partir da radiação incidente, isto é:

$$di_{\eta,s}(\theta, \varphi) = di_{\eta,s} \frac{\Phi(\theta, \varphi)}{4\pi} = \sigma_{\eta} i_{\eta} dS \frac{\Phi(\theta, \varphi)}{4\pi} \quad (3.26)$$

Como a energia espectral por unidade $d\eta$, $d\omega_i$ e dA espalhada em $d\omega_s$ é $di_{\eta,s}(\theta, \varphi)d\omega_s$. Assim a energia espectral espalhada em todos $d\omega_s$ é:

$$\int_{\omega_s=0}^{4\pi} di_{\eta,s}(\theta, \varphi)d\omega_s \quad (3.27)$$

Entretanto, a energia espectral por unidade $d\eta$, $d\omega_i$ e dA é $di_{\eta,s}$, assim:

$$di_{\eta,s} = \int_{\omega_s=0}^{4\pi} di_{\eta,s}(\theta, \varphi)d\omega_s \quad (3.28)$$

Utilizando-se as Equações 3.27 e 3.28, tem-se que a função de fase é:

$$\Phi(\theta, \varphi) = \frac{di_{\eta,s}(\theta, \varphi)}{(1/4\pi) \int_{\omega_s=0}^{4\pi} di_{\eta,s}(\theta, \varphi)d\omega_s} \quad (3.29)$$

Assim, $\Phi(\theta, \varphi)$ é a intensidade espalhada em uma direção, dividida pela intensidade que seria espalhada em uma direção se o espalhamento fosse isotrópico. Para espalhamentos isotrópicos, tem-se a relação:

$$\frac{1}{4\pi} \int_{\omega_s=0}^{4\pi} \Phi(\theta, \varphi)d\omega_s = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \Phi(\theta, \varphi) \sin(\theta) d\theta d\varphi = 1 \quad (3.30)$$

3.3 A equação do transporte radiante em coordenadas cilíndricas

Para o desenvolvimento da equação do transporte radiante em coordenadas cilíndricas bidimensionais, a ETR considerando o espalhamento é escrita da seguinte como:

$$\frac{dI(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})}{ds} = (-\kappa + \sigma)I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) + \kappa I_b(\mathbf{r}) + \frac{\sigma}{4\pi} \int_{4\pi} I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') \Phi(\mathbf{\Omega}', \mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega}' \quad (3.31)$$

onde $I(\mathbf{r}, \Omega)$ é a intensidade radiante, a qual é uma função do vetor posição \mathbf{r} e da direção Ω , s é a abscissa da trajetória do raio, $I_b(\mathbf{r})$ é a intensidade radiante do corpo negro avaliado na temperatura do meio, κ e σ são os coeficientes de absorção e espalhamento, respectivamente e $\Phi(\Omega', \Omega)$ é a função de fase para o espalhamento a partir da direção de partida Ω' para a direção de chegada Ω .

A intensidade radiante do corpo negro, $I_b(\mathbf{r})$, é avaliada, espectralmente, pela relação:

$$I_{\eta b} = \frac{2C_1\eta^3}{e^{C_2\eta/T} - 1} \quad (3.32)$$

onde η é o número de onda, T é a temperatura e $C_1 = 0,59552137 \times 10^{-16} \text{ W} \cdot \text{m}^2/\text{sr}$ e $C_2 = 0,014387752 \text{ m} \cdot \text{K}$ são constantes da distribuição espectral de Planck.

Em um sistema de coordenadas cilíndricas como mostrado na Figura 3.4, a intensidade radiante é função das variáveis ρ, Ψ, z, θ e φ .

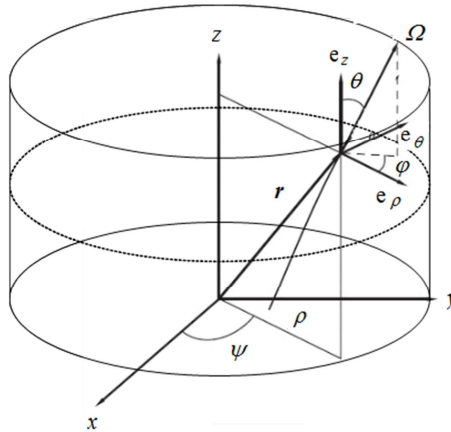


Figura 3.4 – Sistema utilizado em geometrias cilíndricas.

Ao mover ao longo de um determinado caminho, o operador d/ds tem a seguinte forma:

$$\frac{d}{ds} = \frac{\partial}{\partial \rho} \times \frac{d\rho}{ds} + \frac{\partial}{\partial \Psi} \times \frac{d\Psi}{ds} + \frac{\partial}{\partial z} \times \frac{dz}{ds} + \frac{\partial}{\partial \theta} \times \frac{d\theta}{ds} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \times \frac{d\varphi}{ds} \quad (3.33)$$

como $d\rho = \mu ds$, $\rho d\Psi = \eta ds$ e $dz = \xi ds$, tem-se:

$$\frac{d}{ds} = \mu \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\eta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \Psi} + \xi \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \theta} \times \frac{d\theta}{ds} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \times \frac{d\varphi}{ds} \quad (3.34)$$

onde μ , η e ξ são os cossenos diretores do vetor tangente à trajetória do raio em coordenadas cilíndricas, e são dados por:

$$\begin{aligned} \mu &= \text{sen } \theta \cos \varphi \\ \eta &= \text{sen } \theta \text{sen } \varphi \\ \xi &= \cos \theta \end{aligned} \quad (3.35)$$

Considerando-se um caso axissimétrico, a derivada $\partial / \partial \Psi$ é nula. Para caminhos em que a trajetória do raio é uma linha reta, o ângulo θ é constante, assim $d\theta / ds$ também é nula, mas o mesmo não acontece com o ângulo φ , pois seu valor muda com a coordenada ρ . Dessa forma, o operador d / ds resume-se a:

$$\frac{d}{ds} = \mu \frac{\partial}{\partial \rho} + \xi \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \times \frac{d\varphi}{ds} \quad (3.36)$$

para a definição do valor de $d\varphi / ds$, primeiramente encontra-se a derivada da Equação 3.36 com relação a s , de modo que:

$$\frac{d\mu}{ds} = \frac{d\mu}{d\theta} \frac{d\theta}{ds} + \frac{d\mu}{d\varphi} \frac{d\varphi}{ds} = \cos \theta \cos \varphi \frac{d\theta}{ds} - \text{sen } \theta \text{sen } \varphi \frac{d\varphi}{ds} \quad (3.37)$$

$$\frac{d\eta}{ds} = \frac{d\eta}{d\theta} \frac{d\theta}{ds} + \frac{d\eta}{d\varphi} \frac{d\varphi}{ds} = \cos \theta \text{sen } \varphi \frac{d\theta}{ds} + \text{sen } \theta \cos \varphi \frac{d\varphi}{ds} \quad (3.38)$$

Da Equação 3.38 tem-se que:

$$\frac{d\theta}{ds} = \frac{1}{\cos \theta \cos \varphi} \left(\frac{d\mu}{ds} + \text{sen } \theta \text{sen } \varphi \frac{d\varphi}{ds} \right) \quad (3.39)$$

Da Equação 3.39, obtém-se:

$$\frac{d\theta}{ds} = \frac{1}{\cos\theta\text{sen}\varphi} \left(\frac{d\eta}{ds} - \text{sen}\theta\cos\varphi \frac{d\varphi}{ds} \right) \quad (3.40)$$

Assim, das Equações 3.39 e 3.40, resulta que:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial s} = \frac{1}{\text{sen}\theta} \left(\cos\varphi \frac{d\eta}{ds} - \text{sen}\varphi \frac{d\mu}{ds} \right) \quad (3.41)$$

Para meios em que o índice de refração é variável e o raio descreve um caminho curvilíneo, a equação do raio, derivada do princípio de Fermat, tem a seguinte forma:

$$\frac{d}{ds} \left(n \frac{d\mathbf{r}}{ds} \right) = \nabla n \quad (3.42)$$

De acordo com Liu et al., 2006, expandindo a Equação 3.42 em coordenadas cilíndricas, resulta em:

$$\cos\psi \frac{d}{ds} [n(\mu\cos\psi - \eta\text{sen}\psi)] + \text{sen}\psi \frac{d}{ds} [n(\mu\text{sen}\psi + \eta\cos\psi)] = \frac{\partial n}{\partial \rho} \quad (3.43)$$

$$-\text{sen}\psi \frac{d}{ds} [n(\mu\cos\psi - \eta\text{sen}\psi)] + \cos\psi \frac{d}{ds} [n(\mu\text{sen}\psi + \eta\cos\psi)] = \frac{1}{\rho} \frac{\partial n}{\partial \psi} \quad (3.44)$$

$$\frac{d}{ds} [n\xi] = \frac{\partial n}{\partial z} \quad (3.45)$$

Aplicando-se a regra da cadeia ao operador d/ds da Equação 3.43, obtém-se:

$$\frac{d\mu}{ds} = \frac{\eta^2}{\rho} + \frac{\mu}{n} \frac{dn}{ds} + \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial \rho} \quad (3.46)$$

Fazendo-se o mesmo para a Equação 3.44 tem-se:

$$\frac{d\eta}{ds} = -\frac{\mu\eta}{\rho} - \frac{\eta}{n} \frac{dn}{ds} + \frac{1}{n\rho} \frac{\partial n}{\partial \psi} \quad (3.47)$$

Considerando-se que os índices de refração não variam ao longo do domínio, isto é, n é constante, todas as derivadas que o envolvem são nulas, de forma que as equações Equações 3.46 e 3.47 resumem-se a:

$$\frac{d\mu}{ds} = \frac{\eta^2}{\rho} \quad (3.48)$$

$$\frac{d\eta}{ds} = -\frac{\mu\eta}{\rho} \quad (3.49)$$

Substituindo-se as Equações 3.48 e 3.49 na Equação 3.41, tem-se:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial s} = \frac{1}{\text{sen}\theta} \left(\cos \varphi \frac{-\mu\eta}{\rho} - \text{sen} \varphi \frac{\eta^2}{\rho} \right) = -\frac{1}{\text{sen}\theta} (\mu \cos \varphi + \eta \text{sen} \varphi) \frac{\eta}{\rho} \quad (3.50)$$

Finalmente, substituindo-se a Equação 3.35 na Equação 3.50, resulta que:

$$\frac{d\varphi}{ds} = -\frac{\eta}{\rho} \quad (3.51)$$

Dessa forma, substituindo-se a Equação 3.51 na Equação 3.36, o operador d/ds , em coordenadas cilíndricas axissimétricas para meios em que o índice de refração é constante e o caminho é linear, tem a seguinte forma:

$$\frac{d}{ds} = \mu \frac{\partial}{\partial \rho} + \xi \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\eta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3.52)$$

Portanto, a equação do transporte radiante é:

$$\mu \frac{\partial I}{\partial \rho} + \xi \frac{\partial I}{\partial z} - \frac{\eta}{\rho} \frac{\partial I}{\partial \varphi} = (-\kappa + \sigma)I + \kappa I_b + \frac{\sigma}{4\pi} \int_{4\pi} I \Phi(\Omega', \Omega) d\Omega' \quad (3.53)$$

Para os casos em que não existe espalhamento, ou que o mesmo possa ser negligenciado, a Equação 3.53 reduz-se a:

$$\mu \frac{\partial I}{\partial \rho} + \xi \frac{\partial I}{\partial z} - \frac{\eta}{\rho} \frac{\partial I}{\partial \varphi} = -\kappa I + \kappa I_b \quad (3.54)$$

4 MODELAGEM DO COEFICIENTE DE ABSORÇÃO DOS GASES

Neste capítulo, é feita uma descrição dos principais modelos usados para descrever o comportamento do coeficiente de absorção dos gases em meios que absorvem e emitem radiação.

4.1 Linha por Linha (LBL)

O método linha por linha resolve a equação do transporte radiante considerando toda a variação espectral do coeficiente de absorção para diferentes temperaturas e concentrações encontradas nas misturas de gases resultantes da combustão. Dessa forma, a equação a ser resolvida para cada direção s , considerando um meio que não espalha, tem a seguinte forma:

$$\frac{\partial I_\eta}{\partial s} = -\kappa_\eta I_\eta + \kappa_\eta I_{b\eta} \quad (4.1)$$

onde κ_η é o coeficiente de absorção do gás, dependente do número de onda e do estado termodinâmico do gás, e $I_{b\eta}$ é a emissão do corpo negro em cada número de onda, descrita por:

$$I_{b\eta} = \frac{2C_1\eta^3}{e^{C_2\eta/T} - 1} \quad (4.2)$$

onde os coeficientes são $C_1 = 0,59552137 \times 10^{-12}$ Wcm²/SR e $C_2 = 1,4387752$ cmK.

A condição de contorno para a Equação 4.1, considerando uma parede não-cinza e difusa, tem a seguinte forma:

$$I_\eta(s_w, \hat{\Omega}) = \varepsilon_{\eta w} I_{b\eta}(T_w) + \frac{\rho_{\eta w}}{\pi} \int_{\mathbf{n} \cdot \hat{\Omega}' < 0} I_\eta(s_w, \hat{\Omega}') |\mathbf{n} \cdot \hat{\Omega}'| d\hat{\Omega}' \quad (4.3)$$

Com a solução da equação do transporte radiante, é possível determinar o fluxo radiante pela seguinte equação:

$$\vec{q} = \int_0^{\infty} \vec{q}_{\eta} d\eta = \int_0^{\infty} \int_{4\pi} I_{\eta}(\hat{s}) \hat{s} d\Omega d\eta \quad (4.4)$$

E o divergente do fluxo radiante pode ser encontrado pela seguinte relação:

$$\nabla \cdot \vec{q} = \nabla \cdot \int_0^{\infty} \vec{q}_{\eta} d\eta \quad (4.5)$$

Das Equações 4.1, 4.4 e 4.5, tem-se que:

$$\nabla \cdot \vec{q} = \int_{\Omega=0}^{4\pi} \int_{\eta=0}^{\infty} (-\kappa_{\eta} I_{\eta} + \kappa_{\eta} I_{b\eta}) d\eta d\Omega \quad (4.6)$$

Este método é o que fornece os resultados mais precisos e que são usados como “benchmarks” na validação de modelos de gases, mas, dependendo do caso a ser resolvido, a solução pode ser inviável computacionalmente inclusive para problemas bidimensionais. Para a viabilização dos cálculos em tempo hábil, empregam-se modelos para descrever o coeficiente de absorção. Os principais modelos existentes serão discutidos a seguir.

4.2 Modelo do Gás Cinza

Este modelo é o mais simples dentre os existentes, pois considera que o coeficiente de absorção do gás não possui variação espectral. Como pode ser visto na Figura 4.1, essa hipótese é muito rudimentar, observando-se que o coeficiente de absorção varia fortemente com o número de onda.

Apesar da pouca correção do modelo, ele ainda é muito utilizado em processos de combustão, especialmente em simulações tri-dimensionais.

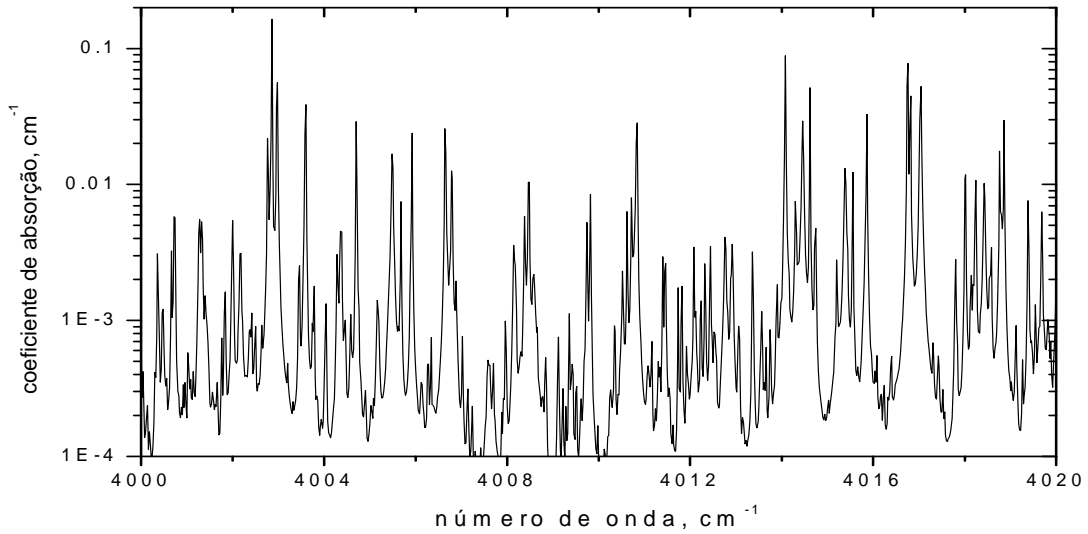


Figura 4.1 – Coeficiente de absorção para 10% H₂O a uma temperatura de 2000 K (HITEMP)

Assim, considerando a hipótese de meio cinza, a equação do transporte radiante para meios que não espalham a radiação é:

$$\frac{dI}{ds} = -\kappa I + \kappa I_b \quad (4.7)$$

sujeita à seguinte condição de contorno:

$$I_w = \varepsilon_w I_b(T_w) + \frac{(1-\varepsilon_w)}{\pi} \int_{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{s}} < 0} I |\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{s}}| d\Omega \quad (4.8)$$

Em uma tentativa de minimizar o efeito provocado pela hipótese de assumir um meio cinza, o coeficiente de absorção dos gases geralmente é escrito em função da temperatura e da concentração dos gases, onde seu valor é estimado usando-se uma média de Planck, definida como:

$$\kappa = \frac{\int_{\eta} \kappa_{\eta} I_{b\eta} d\eta}{\int_{\eta} I_{b\eta} d\eta} \quad (4.9)$$

Neste trabalho, são usadas expressões polinomiais obtidas por Barlow et al., 2001, para descrever o coeficiente de absorção dos principais gases resultantes do processo de

combustão do metano (CO, CO₂, H₂O) e para a fuligem. Essas expressões estão listadas na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Ajustes polinomiais para o coeficiente de absorção dos gases

Espécies	Coeficiente de Absorção		
CO	$\kappa = c_0 + T(c_1 + T(c_2 + T(c_3 + Tc_4)))$ em $\text{m}^{-1}\text{atm}^{-1}$		
	$300 \leq T \leq 750$		$750 < T \leq 2500$
	c_0	4,7869	10,09
	c_1	-0,06953	-0,01183
	c_2	$2,95775 \times 10^{-4}$	$4,7753 \times 10^{-6}$
	c_3	$-4,25732 \times 10^{-7}$	$-5,87209 \times 10^{-10}$
	c_4	$2,02894 \times 10^{-10}$	$-2,5334 \times 10^{-14}$
CO ₂ e H ₂ O	$\kappa = \sum_{i=0}^5 c_i (1000/T)^i$ em $\text{m}^{-1}\text{atm}^{-1}$		
	H ₂ O	CO ₂	
	c_0	-0,23093	18,741
	c_1	1,129	-21,31
	c_2	9,4153	273,5
	c_3	-2,9988	-194,05
	c_4	0,51382	56,31
	c_5	$-1,8684 \times 10^{-5}$	-5,8169
C	$\kappa = 1186 f_v T$ em m^{-1}		

4.3 O Modelo da Soma ponderada de gases cinzas

O modelo da soma ponderada de gases cinzas (WSGG) foi inicialmente desenvolvido por Hottel e Sarofim, 1967, no contexto do método das zonas. Com o passar dos anos, os recursos computacionais foram avançando e métodos mais eficientes de solução foram desenvolvidos. Assim, dada a eficiência do modelo WSGG, tornou-se necessário resolver a equação do transporte radiante usando os demais métodos de solução. Dessa forma, Modest, 1991, incorporou o modelo WSGG à equação do transporte radiante, tornando possível a solução por qualquer método disponível.

Como o modelo WSGG consiste em substituir a variação espectral do coeficiente de absorção por J gases cinzas, a ideia usada por Modest foi de integrar a equação separadamente em cada um dos J gases cinzas usados, e então a intensidade total é encontrada através do somatório de todas as intensidades parciais calculadas. Isto é,

$$\frac{\partial I_j}{\partial s} = -\kappa_j I_j + \kappa_j I_{bj} \quad (4.10)$$

onde κ_j é o coeficiente de absorção e I_{bj} é o valor da intensidade do corpo negro correspondente a região de κ_j , isto é,

$$I_{bj} = \int_{\Delta\eta_j} I_b(\eta, T) d\eta \quad (4.11)$$

onde a Equação 4.11 pode ser reescrita como:

$$I_{bj} = \frac{\int_{\Delta\eta_j} I_b(\eta, T) d\eta}{I_b(T)} I_b(T) = a_j I_b(T) \quad (4.12)$$

onde a_j é visto como peso correspondente ao j -ésimo gás cinza usado no modelo. A equação do transporte com o método WSGG é descrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial I_j}{\partial s} = \kappa_j (a_j I_b - I_j) \quad (4.13)$$

Com a seguinte condição de contorno:

$$I_j(s, \hat{\Omega}) = \varepsilon(s) a_j(s) I_b(T_w) + \frac{\rho(s)}{\pi} \int_{\mathbf{n} \cdot \hat{\Omega}' < 0} I_j(s_w, \hat{\Omega}') |\mathbf{n} \cdot \hat{\Omega}'| d\hat{\Omega}' \quad (4.14)$$

Esse método é amplamente utilizado nos principais softwares comerciais que tratam a transferência de calor por radiação, tais como o “Fluent”, “CFX”, “StarCD”, entre outros.

Com maior frequência, utilizam-se as correlações propostas por Smith et al., 1982, para a mistura de gases e para a fuligem. As correlações para os gases são compostas de três coeficientes de absorção constantes ($j = 1, 2, 3$), otimizados e não nulos, e a variação com a temperatura e a concentração do meio fica a cargo dos pesos, que são polinômios de terceira ordem, descritos da seguinte maneira:

$$a_j = \sum_{i=1}^3 b_{ji} T^{i-1} \quad (4.15)$$

Para a fuligem, são usadas as correlações propostas por Smith et al., 1987, onde o coeficiente de absorção é composto por 2 valores não-nulos, e os pesos também são calculados pela Equação 4.15. Os valores dos coeficientes de absorção e dos coeficientes b_{ij} , tanto para a mistura de gases quanto para a fuligem, são listadas na tabela.

Tabela 4.2 – Coeficientes usados no modelo WSGG

Mistura, $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$					
j	$\kappa_{g,j} \text{ (m}^{-1}\text{atm}^{-1}\text{)}$	$b_{g,j,1} \times 10^1$	$b_{g,j,2} \times 10^4$	$b_{g,j,3} \times 10^7$	$b_{g,j,4} \times 10^{11}$
1	0,4201	6,508	-5,551	3,029	-5,353
2	6,516	-0,2504	6,112	-3,882	6,528
3	131,9	2,718	-3,118	1,221	-1,612
Soot					
j	$\kappa_{s,j} \text{ (m}^{-1}\text{)}$	$b_{s,j,1}$	$b_{s,j,2} \times 10^4$	$b_{s,j,3} \times 10^7$	$b_{s,j,4} \times 10^{11}$
1	$1,00802 \times 10^6$	1,42	-7,7942	-0,38408	2,4166
2	$3,2352 \times 10^6$	-0,42	7,7942	0,38408	-2,4166

4.4 O Modelo da soma ponderada de gases cinzas baseado nas linhas espectrais (SLW)

O modelo SLW considera a variação espectral do coeficiente de absorção. Seu princípio é muito semelhante ao modelo da soma ponderada de gases cinzas, onde os pesos usados na equação do transporte radiante são baseados na função distribuição ALB que será descrito a seguir.

4.4.1 A função Distribuição ALB

A função distribuição ALB desenvolvida por Denison e Webb, 1993b, é definida como a fração de energia do corpo negro nas regiões em que o espectro do gás $C_{abs,\eta}$ é menor que um valor prescrito C_{abs} , como o ilustrado na Figura 4.2. As partes em que a função ALB é calculada estão representadas pela região sombreada.

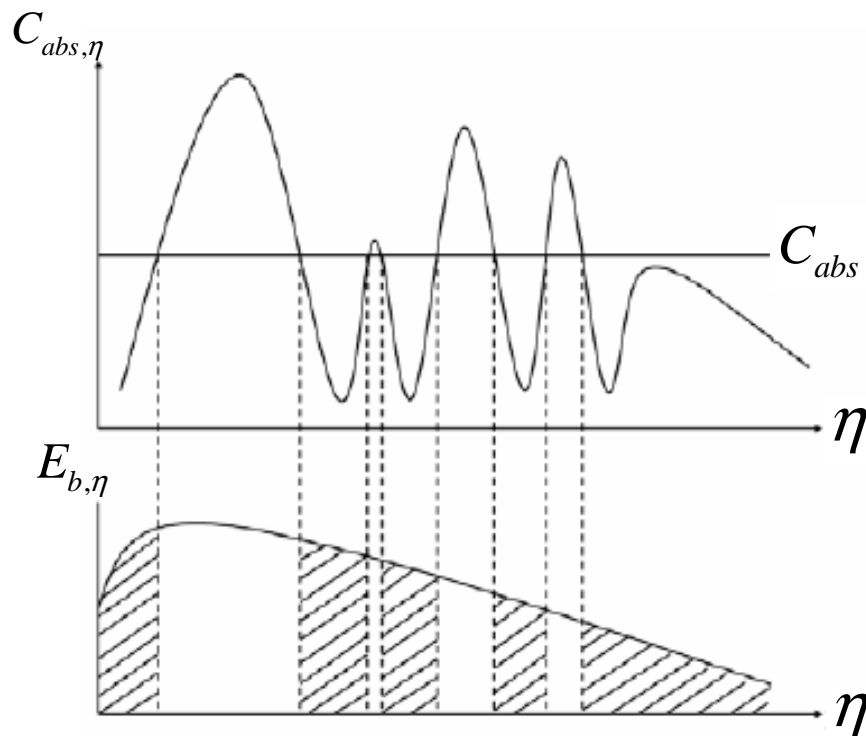


Figura 4.2 – Partes do espectro em que a função ALB é calculada.

A função distribuição ALB é expressa pela seguinte equação:

$$F(C_{abs}) = \frac{\pi}{\sigma T^4} \sum_i \int_{\Delta\eta_i} I_{b\eta}(T, \eta) d\eta \quad (4.16)$$

onde σ é a constante de Stefan-Boltzmann e $I_{b\eta}$ é a função de Planck avaliada no número de onda η na temperatura da fonte T . O sub-índice i refere-se ao i -ésimo segmento espectral e o somatório é feito em todos os segmentos, cobrindo todo o espectro. A função F tem um aumento monótopo à medida em que se aumenta a seção transversal C_{abs} , e fechada entre 0 e 1. Denison e Webb, 1993b, propuseram correlações para a função distribuição ALB baseadas

no banco de dados HITRAN (versão 1992), tanto para as moléculas de H₂O quanto para as de CO₂. Da seguinte forma:

$$F = \frac{1}{2} \tanh \left[P_F (T_g, T_b, \xi - \xi_{sb}) \right] + \frac{1}{2} \quad (4.17)$$

onde a função P_F é:

$$P_F (T_g, T_b, \xi) = \sum_{l=0}^3 \sum_{m=0}^3 \sum_{n=0}^3 a_{lmn} \left(\frac{T_g}{2500} \right)^n \left(\frac{T_b}{2500} \right)^m \xi^l \quad (4.18)$$

$$\xi = \ln (C_{abs}) \quad (4.19)$$

$$\xi_{sb} = \sum_{l=0}^3 \sum_{m=0}^3 \sum_{n=0}^2 b_{lmn} \left(\frac{T_b}{2500} \right)^n \xi^m Y^{l+1} \quad (4.20)$$

os valores de T_b e T_g são em K e C_{abs} está em m²/mol. Y é a concentração do gás e é usado somente para as moléculas de H₂O. Para as moléculas de CO₂ o alargamento espectral é independente de Y , assim $\xi_{sb} = 0$.

Para as moléculas de H₂O, os coeficientes a_{lmn} são apresentados na Tabela 4.3. Os valores foram ajustados dentro da faixa de 3×10^{-5} a 60 m²/mol para a seção transversal de absorção C_{abs} e entre 400 e 2500 K para a temperatura.

A Equação 4.17 pode ser aplicada até a pressão de uma atmosfera. Denison e Webb, 1993b, recomendam que a correlação não deva ser usada para temperaturas maiores que 2500 K. Os coeficientes b_{lmn} são apresentados na Tabela 4.4, os quais levam em conta a variação da fração molar do vapor de água entre 0 e 1. Para as moléculas de CO₂, os valores dos coeficientes a_{lmn} são apresentados na Tabela 4.5. Os valores da função distribuição ALB para o CO₂ são essencialmente independentes da concentração molar, portanto os valores de ξ_{sb} na Equação 4.20 são negligenciados.

Tabela 4.3 – Valores dos coeficientes a_{lmn} para H₂O.

$l = 0$				
	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
$m = 0$	1,6103	-4,0931	5,1435	-2,0857
$m = 1$	-0,81812	15,5525	-21,819	9,8775
$m = 2$	2,6001	-21,204	31,0828	-14,279
$m = 3$	-1,3171	9,6524	-14,474	6,6747
$l = 1$				
	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
$m = 0$	0,440187	-0,63348	0,871627	-0,38798
$m = 1$	-0,82164	5,0239	-5,9818	2,6355
$m = 2$	1,5149	-7,8032	9,8642	-4,1931
$m = 3$	-0,81023	3,727	-4,874	1,9868
$l = 2$				
	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
$m = 0$	0,106647	-0,43116	0,689598	-0,29831
$m = 1$	-0,38573	1,8865	-2,9712	1,2834
$m = 2$	0,578351	-2,6218	4,2698	-1,7929
$m = 3$	-0,28014	1,1785	-1,9568	0,787249
$l = 3$				
	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
$m = 0$	$8,25027 \times 10^{-3}$	$-3,28556 \times 10^{-2}$	$6,81563 \times 10^{-2}$	$-3,04815 \times 10^{-2}$
$m = 1$	$-3,10578 \times 10^{-2}$	0,123369	-0,26154	0,117452
$m = 2$	$4,39319 \times 10^{-2}$	-0,15792	0,350948	-0,15308
$m = 3$	$-2,03699 \times 10^{-2}$	$6,61142 \times 10^{-2}$	-0,15283	$6,34035 \times 10^{-2}$

Tabela 4.4 – Valores dos coeficientes b_{lmn} para H₂O.

$l = 0$			
	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$
$m = 0$	4,72	-8,5482	5,2394
$m = 1$	-0,84969	0,312478	-0,13804
$m = 2$	$-3,47243 \times 10^{-2}$	$4,02461 \times 10^{-2}$	$-5,80104 \times 10^{-2}$
$m = 3$	$5,79830 \times 10^{-4}$	$3,94125 \times 10^{-3}$	$-5,29017 \times 10^{-3}$
$l = 1$			
	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$
$m = 0$	-8,9615	16,9547	-10,76
$m = 1$	1,5861	-2,0166	1,46
$m = 2$	$4,34730 \times 10^{-2}$	-0,67133	0,633231
$m = 3$	$2,87067 \times 10^{-3}$	$-7,06830 \times 10^{-2}$	$6,23710 \times 10^{-2}$
$l = 2$			
	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$
$m = 0$	9,1461	-17,327	11,1864
$m = 1$	-1,3975	1,9965	-1,6935
$m = 2$	$8,46419 \times 10^{-2}$	0,599994	-0,70054
$m = 3$	$7,14719 \times 10^{-3}$	$6,62086 \times 10^{-2}$	$-6,87294 \times 10^{-2}$
$l = 3$			
	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$
$m = 0$	-3,5504	6,624	-4,3058
$m = 1$	0,485392	-0,7071	0,689109
$m = 2$	$-6,77456 \times 10^{-2}$	-0,18179	0,269308
$m = 3$	$-5,92726 \times 10^{-3}$	$-2,04694 \times 10^{-2}$	$2,56411 \times 10^{-2}$

Tabela 4.5 – Valores dos coeficientes a_{lmn} para CO_2 .

$l = 0$				
	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
$m = 0$	2,45702	-5,45334	6,53751	-2,52344
$m = 1$	-4,0232	15,67297	-24,3247	11,33757
$m = 2$	7,54549	-23,8023	39,51896	-19,1137
$m = 3$	-3,63104	11,9078	-20,3606	9,97877
$l = 1$				
	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
$m = 0$	$7,65678 \times 10^{-2}$	2,36184	-3,95061	2,17482
$m = 1$	0,2901819	-12,0041	22,44342	-13,0467
$m = 2$	-0,64282	-21,5003	-40,8667	23,66762
$m = 3$	0,3942158	-11,5818	22,05176	-12,6536
$l = 2$				
	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
$m = 0$	$-3,30582 \times 10^{-2}$	0,4367742	-0,725331	0,4138566
$m = 1$	0,3672993	-3,52466	6,74885	-3,96295
$m = 2$	-0,69811	6,60703	-12,9667	7,58713
$m = 3$	0,3831158	-3,65683	7,19415	-4,16496
$l = 3$				
	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
$m = 0$	$1,87927 \times 10^{-3}$	$1,92123 \times 10^{-2}$	$3,25863 \times 10^{-2}$	$1,98493 \times 10^{-2}$
$m = 1$	$2,85033 \times 10^{-2}$	-0,223537	0,4402715	-0,26267
$m = 2$	$-5,49594 \times 10^{-2}$	0,4370937	-0,881494	0,521958
$m = 3$	$3,04198 \times 10^{-2}$	-0,247793	0,4990777	-0,291566

4.4.2 O modelo SLW

No modelo SLW, a faixa do coeficiente de absorção é dividida usando $n+1$ seções transversais constantes C , gerando n faixas que cobrem todo o domínio do coeficiente de absorção. Assim, cada vez em que o coeficiente de absorção está contido entre duas seções transversais adjacentes, isto é, $C_j \leq \kappa \leq C_{j+1}$ gera-se um certo número de intervalos de número de onda $\Delta\eta_{i,j}$, para $j = 1, 2, \dots, n$, conforme ilustrado na Figura 4.3.

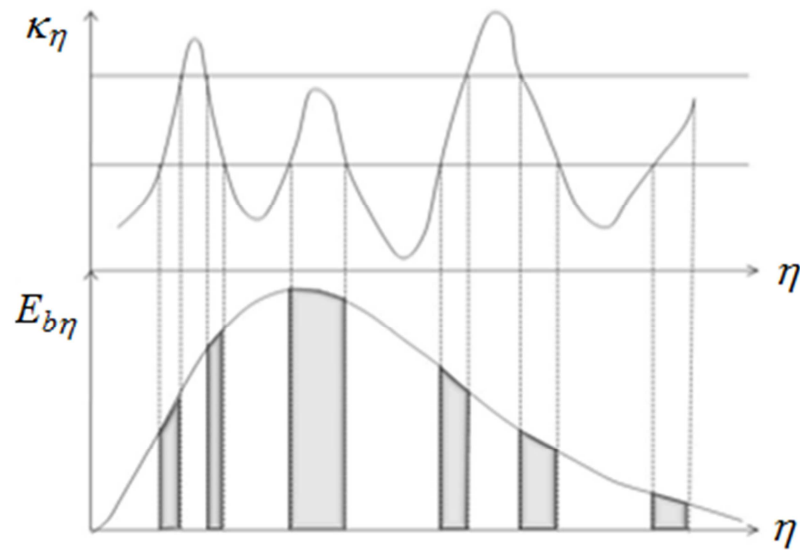


Figura 4.3 – Seções transversais usadas no modelo SLW

Em seguida, integra-se a equação do transporte radiante separadamente em cada uma das n faixas em que o coeficiente de absorção foi dividido, considerando todos os intervalos de número de onda gerados em cada faixa, da seguinte forma:

$$\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \frac{dI_\eta}{ds} d\eta = \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} (-\kappa_\eta I_\eta + \kappa_\eta I_{b\eta}) d\eta, \quad j=1,2,\dots,n \quad (4.21)$$

dentro de cada uma das n faixas geradas, considera-se que o coeficiente de absorção é constante, podendo assumir qualquer valor que esteja entre duas seções transversais adjacentes. Geralmente usa-se uma média geométrica entre os limites de cada intervalo, ou seja:

$$\kappa_j = \sqrt{C_{j+1}C_j} \quad (4.22)$$

Considerando κ_j constante e aplicando a regra de Leibnitz do lado esquerdo da Equação 4.21, obtém-se a seguinte equação:

$$\frac{d}{ds} \left[\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_\eta d\eta \right] = -\kappa_j \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_\eta d\eta + \kappa_j \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_{b\eta} d\eta + \sum_i I_\eta(\eta_{i,j}^u) \frac{d\eta_{i,j}^u}{ds} - \sum_i I_\eta(\eta_{i,j}^l) \frac{d\eta_{i,j}^l}{ds} \quad (4.23)$$

Negligenciando-se os dois últimos termos do lado direito da igualdade, obtém-se:

$$\frac{dI_j}{ds} = -\kappa_j I_j + \kappa_j a_j I_b \quad (4.24)$$

onde I_j é definido como:

$$I_j = \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_\eta d\eta \quad (4.25)$$

e a_j é uma função de ponderação, que pode ser facilmente calculada usando o conceito da função distribuição ALB, da seguinte maneira:

$$a_j = F(C_{j+1}) - F(C_j) = \left(\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_{b\eta} d\eta \right) / I_b \quad (4.26)$$

A condição de contorno necessária para a Equação 4.24 é idêntica à da Equação 4.13, mas neste caso os valores de a_j são calculados pela diferença de duas funções distribuição ALB adjacentes, como mostrado na Equação 4.26.

A aplicação do modelo SLW à uma mistura de gases é uma tarefa mais difícil, pois a função distribuição ALB deve ser recalculada cada vez em que o estado termodinâmico da mistura muda. Com o intuito de facilitar o uso desse método, Solovjov e Webb, 2000, apresentaram algumas aproximações que podem ser usadas na modelagem. Uma dessas aproximações é a descrita na Equação 4.27, muito útil em problemas não-homogeneos.

$$F_{Y\kappa_\eta}(C) = F_{\kappa_\eta}(C/Y) \quad (4.27)$$

Para a mistura de gases, três aproximações foram apresentadas pelos autores para aproximar a função distribuição ALB. A superposição, a multiplicação e uma aproximação híbrida, que usa tanto a superposição quanto a multiplicação. A superposição é descrita como:

$$F_{\text{super}}(C_j) = (1-m) + \sum_{i=1}^m F_i(C_j / Y_i) \quad (4.28)$$

onde m é o número de gases na mistura.

O aproximação da função distribuição ALB por multiplicação em uma mistura é dada por:

$$F_{\text{multi}}(C_j) = \prod_{i=1}^m F_i(C_j / Y_i) \quad (4.29)$$

De acordo com as comparações feitas por Solovjov e Webb, 2000, para uma mistura de gases (sem a presença de partículas sólidas) a aproximação por multiplicação é a que melhor descreve a função distribuição ALB. Mas em uma mistura de gases e fuligem, a aproximação híbrida é a mais indicada. Essa aproximação é definida da seguinte maneira:

$$F_h(C) = \left[F_{\text{multi}}(C) \ln(a/C) + F_{\text{super}}(C) \ln(C/b) \right] / \ln(b/a) \quad (4.30)$$

onde a e b são os limites mínimo e máximo de coeficientes de absorção usados no cálculo da função ALB.

4.5 O Modelo do Número de Onda Cumulativo (CW)

O modelo CW (*cumulative wavenumber*), desenvolvido por Solovjov e Webb, 2002, é um método baseado na seção de absorção transversal dos gases (C_η , cm²/molec.). Esse método consiste em uma função não decrescente, a qual depende do número de onda e é definida da seguinte maneira:

$$w(C, \eta) = \int_0^\eta H(C - C_\eta) d\eta \quad (4.31)$$

onde $H(C - C_\eta)$ é a função de passo Heaviside, assim:

$$w(C, \eta) = \begin{cases} \sum_{i=1}^L (\beta_i - \alpha_i) + (\eta - \eta^*) & \text{se } C_\eta < C \\ \sum_{i=1}^L (\beta_i - \alpha_i) & \text{se } C_\eta \geq C \end{cases} \quad (4.32)$$

onde os intervalos $[\alpha_i, \beta_i]$ são obtidos pela intersecção do espectro C_η com a linha $C_\eta = C$ e η^* é o maior número de onda da intersecção para o caso em que, para um dado número de onda η , a seção de absorção transversal dos gases C_η é menor que o valor de C , conforme pode ser visto na Figura 4.4.

Nota-se que a função CW é uma reta inclinada enquanto o valor de C é maior que o espectro de absorção e ainda que a função é constante enquanto C é menor que o espectro. Fazendo-se a derivada da função CW em relação ao número de onda, tem-se:

$$\frac{\partial w(C, \eta)}{\partial \eta} = \begin{cases} 1 & \text{se } C_\eta < C \\ 0 & \text{se } C_\eta > C \end{cases} \quad (4.33)$$

Segue que, utilizando-se a Equação 4.33, pode-se substituir a integração com respeito a variável independente η sobre a região espectral definida pelo espectro de absorção molecular, pela integração com respeito ao número de onda cumulativo da seguinte maneira:

$$\int_{\{\eta: C_\eta < C\}} d\eta = \int_{\eta=0}^{\infty} \frac{\partial w(C, \eta)}{\partial \eta} d\eta = \int_{\eta=0}^{\infty} dw(C, \eta) \quad (4.34)$$

o domínio de integração do lado esquerdo da Equação 4.34 é a união de todos os intervalos limitados pela intersecção $C = C_\eta$, onde $C_\eta < C$. Esse domínio é uma região muito complexa, pois pode conter milhares de intervalos. Por outro lado, o domínio de integração do lado direito da igualdade é simplesmente o conjunto de todos os números de onda contidos no espectro de absorção molecular.

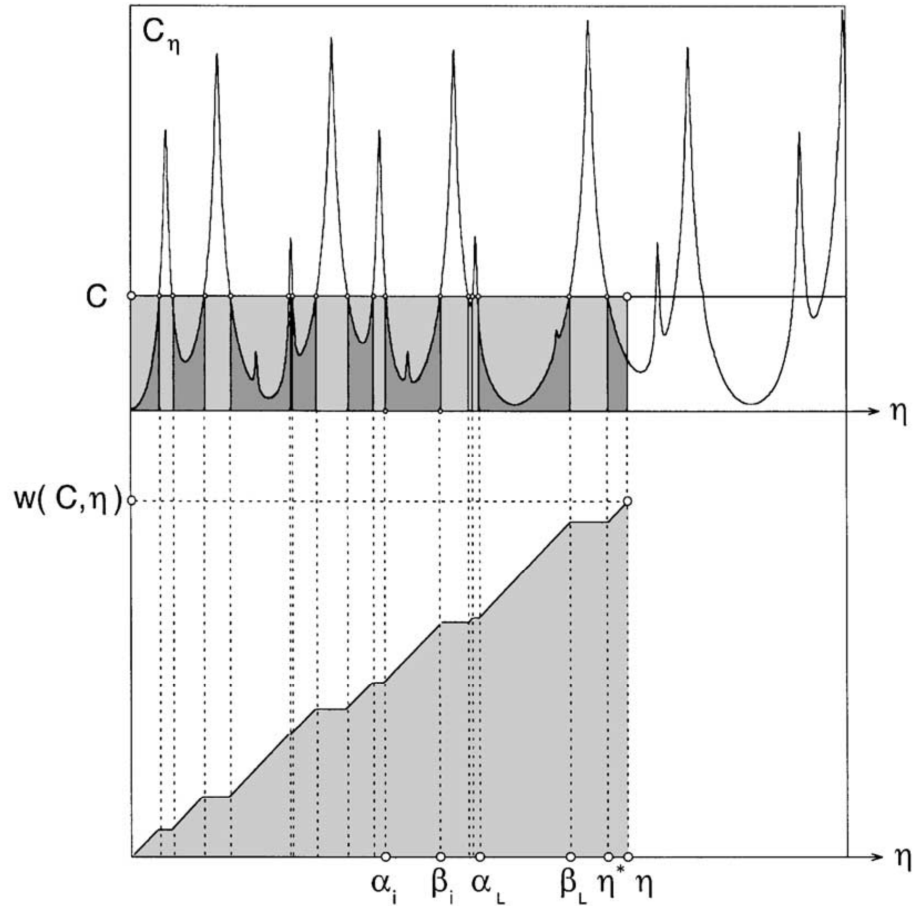


Figura 4.4 – Forma esquemática do número de onda cumulativo [Solovjov e Webb, 2002].

De acordo com Solovjov e Webb, 2005, podem ser feitas algumas simplificações para facilitar o emprego do método CW. Ao se negligenciar o alargamento do espectro quando se varia a concentração dos gases, o espectro para o gás na nova concentração apenas desloca-se verticalmente, como pode ser visto na Figura 4.5. Assim, a relação entre a curva CW para a substância pura e a curva CW para uma substância com concentração menor é:

$$w_{YC_\eta}(C, \eta) = w_{C_\eta}(C/Y, \eta) \quad (4.35)$$

onde w_{C_η} e w_{YC_η} são os números de onda cumulativo do espectro de absorção dos gases C_η e YC_η respectivamente e Y é a concentração do gás. Com essa suposição, as intersecções da seção transversal C com o espectro YC_η produzem os mesmos intervalos de número de onda que as intersecções da seção transversal C/Y com o espectro C_η . Assim, o número de onda

cumulativo do espectro YC_η em C é igual ao número de onda cumulativo do espectro C_η em C/Y .

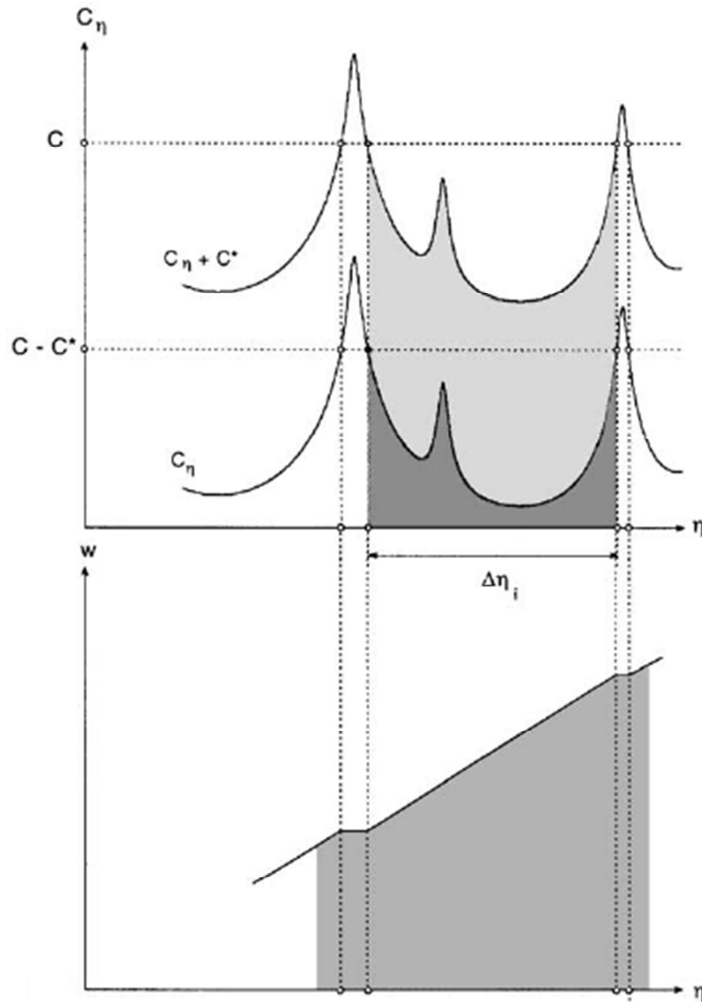


Figura 4.5 – Dependência do número de onda cumulativo com a concentração [Solovjov e Webb, 2002].

Ao supor que seja adicionada uma constante C^* ao espectro de absorção dos gases C_η , o espectro será representado pela soma $C_\eta + C^*$, que pode ser interpretado pela superposição do espectro de absorção molecular com um coeficiente de absorção de partículas cinzas. Esse caso pode ser interpretado como no anterior, pois o espectro sofre um deslocamento vertical. Assim, as intersecções da secção transversal C com o espectro $C_\eta + C^*$ produzem os mesmos intervalos de número de onda que as intersecções da secção transversal $C - C^*$ com o espectro C_η , como pode ser visto na Figura 4.6.

Assim, tem-se a seguinte propriedade:

$$w_{C_\eta + C^*}(C, \eta) = w_{C_\eta}(C - C^*, \eta) \quad (4.36)$$

onde $w_{C_\eta + C^*}(C, \eta)$ é a função CW em relação ao espectro $C_\eta + C^*$ na secção transversal C e $w_{C_\eta}(C - C^*, \eta)$ é a função CW em relação ao espectro C_η na secção transversal $C - C^*$. Esta relação é útil na simplificação do modelo quando se considera a fuligem resultante do processo de combustão.

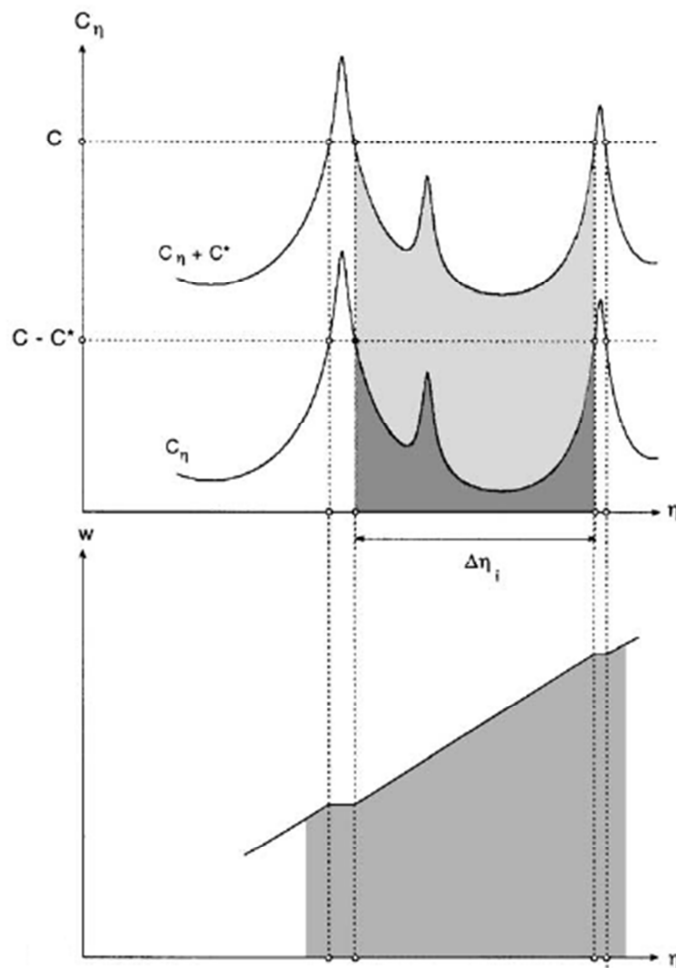


Figura 4.6 – Dependência do número de onda cumulativo com uma constante adicionada ao espectro [Solovjov e Webb, 2002].

Pode-se agregar as Equações 4.35 e 4.36, obtendo-se assim uma relação para o número de onda cumulativo do espectro de absorção molecular $YC_\eta + C^*$, da seguinte maneira:

$$w_{YC_\eta+C^*}(C, \eta) = w_{C_\eta}(C/Y - C^*/Y, \eta) \quad (4.37)$$

Para casos em que existe uma mistura com m gases a diferentes concentrações, o espectro dessa mistura pode ser escrito como:

$$C_\eta = Y_1 C_1 + Y_2 C_2 + \dots + Y_m C_m \quad (4.38)$$

Assim, o número de onda cumulativo da mistura dos m gases pode ser determinado somando o número de onda associado a cada espectro, da seguinte maneira:

$$w_{C_\eta}(C, \eta) = w_1 \left(\frac{C}{Y_1}, \eta \right) + w_2 \left(\frac{C}{Y_2}, \eta \right) + \dots + w_m \left(\frac{C}{Y_m}, \eta \right) - (m-1)\eta \quad (4.39)$$

Pode ser determinado o número de onda cumulativo de uma mistura quando se considera, por exemplo, a fuligem, fazendo uma associação das Equações 4.39 e 4.36, da seguinte forma:

$$w_{C_\eta+C^*}(C, \eta) = w_1 \left(\frac{C}{Y_1} - C^*, \eta \right) + w_2 \left(\frac{C}{Y_2} - C^*, \eta \right) + \dots + w_m \left(\frac{C}{Y_m} - C^*, \eta \right) - (m-1)\eta \quad (4.40)$$

onde w_i são os valores do número de onda cumulativo para as espécies individuais incluídas na mistura.

Considerando uma subdivisão de todo o domínio de absorção em gases cinzas, através das secções transversais suplementares C_j , para $j = 1, 2, 3, \dots, n$, onde n é o número de gases cinzas, conforme pode ser visto na Figura 4.7. Considera-se o conjunto H_j como a união de todos os números de onda para o qual a faixa do espectro de absorção molar C_η está entre as secções transversais suplementares C_j e C_{j-1} , expresso como:

$$H_j = \{ \eta : C_{j-1} \leq C_\eta \leq C_j \}, \quad j = 1, 2, 3, \dots, n \quad (4.41)$$

De maneira análoga, tem-se a subdivisão da região do número de onda em subintervalos:

$$\Delta_i = [\eta_{i-1}, \eta_i], \quad i = 1, 2, 3, \dots, m \quad (4.42)$$

As regiões do espectro definidas como gases cinzas fracionais, D_{ij} , são obtidas pela intersecção das duas subdivisões espectrais definidas anteriormente, isto é:

$$D_{ij} = \Delta_i \cap H_j \quad (4.43)$$

A união de todos os gases cinzas fracionais D_{ij} resulta no domínio total do espectro de absorção molecular dos gases. Entretanto, os valores de Δ_i permanecem fixos para qualquer localização no meio considerado, mas H_j e D_{ij} podem mudar suas localizações dependendo do estado termodinâmico local do gás. A partir desse ponto, aplica-se esse modelo para subdividir a integração espectral sobre o espaço do número de onda em uma integração sobre os gases cinzas fracionários D_{ij} . A subdivisão em gases cinzas H_j é usada para simplificação da linha molecular. Cada gás cinza é representado por um único valor do coeficiente de absorção a_j . A subdivisão em intervalos de número de onda Δ_i é usada para a incorporação das contribuições da continuidade do espectro, como por exemplo, as partículas de fuligem e contornos não-cinzas.

O número de onda cumulativo $w(C, \eta)$ é definido através do espectro da seção transversal de absorção molecular C_η , o qual é uma função das propriedades termodinâmicas locais dos gases (temperatura, pressão parcial, concentrações das espécies). Em meios não-isotérmicos e não-homogêneos. Cada localização sobre um caminho arbitrário s é caracterizada por seu próprio estado termodinâmico. Assim, o número de onda cumulativo também depende da localização s , isto é, $w(C, s, \eta)$.

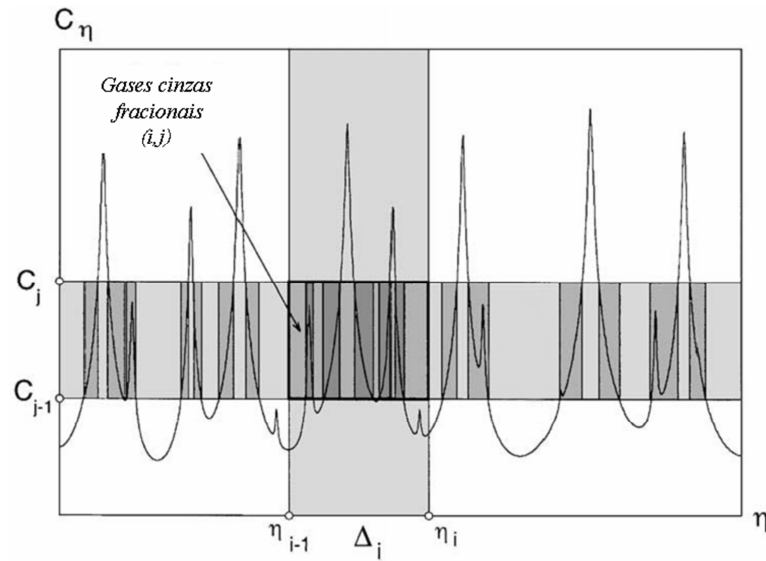


Figura 4.7 – Modelagem espectral dos gases cinzas fracionários [Solovjov e Webb, 2002].

A correlação espectral local é definida pela diferença entre o número de onda cumulativo entre duas seções transversais suplementares adjacentes. Para cada gás cinza fracionária, essa diferença pode ser representada pelo produto de duas funções, tais que uma depende somente da localização s e outra somente do número de onda η .

$$w(C_j, s, \eta) - w(C_{j-1}, s, \eta) = u_{ij}(s) v_{ij}(\eta) \quad \forall \eta \in \Delta_i \quad (4.44)$$

Essa relação não é válida para o espectro como um todo, e sim para as regiões limitadas por $D_{ij} = \Delta_i \cap H_j$, por isso o nome de correlação espectral local. A relação acima é muito mais matemática que física, pois representa uma separação das variáveis espectrais e espaciais na função, a qual representa a diferença de dois números de onda cumulativos em seções transversais suplementares adjacentes. Como o número de onda cumulativo não é uma função de crescimento muito rápido, pois apresenta um crescimento menor que uma função linear, a diferença entre dois números de onda cumulativos é praticamente constante com respeito à η , desde que seja considerado um intervalo espectral Δ_i suficientemente pequeno. Por isso que essa relação é uma aproximação que será tanto melhor quanto menor for o intervalo Δ_i e quanto mais próximos forem as seções transversais suplementares C_j e C_{j-1} .

Para definir a função $v_{ij}(\eta)$, deve-se escolher algum ponto de referência s^* . Esse ponto pode ser escolhido arbitrariamente para o ponto em que $u_{ij}(s^*) = 1$, assim:

$$v_{ij}(\eta) = w(C_j, s^*, \eta) - w(C_{j-1}, s^*, \eta) \quad (4.45)$$

dessa forma, para um ponto s qualquer, a função $u_{ij}(s)$ pode ser calculada por:

$$u_{ij}(s) = \frac{w(C_j, s, \eta) - w(C_{j-1}, s, \eta)}{w(C_j, s^*, \eta) - w(C_{j-1}, s^*, \eta)} \quad (4.46)$$

a integração da intensidade espectral de radiação, I_η , sobre os gases cinzas fracionários D_{ij} , resulta em:

$$\begin{aligned} \int_{D_{ij}} I_\eta d\eta &= \int_{\{\eta: C_{j-1} < C_\eta < C_j\}} I_\eta d\eta \\ &= \int_{\{\eta: C_\eta < C_j\} \cap \Delta_i} I_\eta d\eta - \int_{\{\eta: C_\eta < C_{j-1}\} \cap \Delta_i} I_\eta d\eta \\ &= \int_{\Delta_i} I_\eta dw(C_j, \eta) - \int_{\Delta_i} I_\eta dw(C_{j-1}, \eta) \\ &= \int_{\Delta_i} I_\eta d[w(C_j, s, \eta) - w(C_{j-1}, s, \eta)] \\ &= \int_{\Delta_i} I_\eta d[u_{ij}(s)v_{ij}(\eta)] \\ &= u_{ij}(s) \int_{\Delta_i} I_\eta d[v_{ij}(\eta)] \\ &= u_{ij}(s) J_{ij}(s) \end{aligned} \quad (4.47)$$

onde J_{ij} é chamado de intensidade do gás cinza fracional e u_{ij} é um fator local de correção para essa intensidade. A intensidade total de radiação é determinada pelo somatório de todas as intensidades dos gases cinzas, ponderadas pelo fator de correção u_{ij} , assim:

$$I(s) = \int_0^\infty I_\eta(s) d\eta = \sum_{i,j} u_{ij}(s) J_{ij}(s) \quad (4.48)$$

Assim, a equação do transporte radiante pelo método CW, considerando um meio que não espalha a radiação, tem a seguinte forma:

$$\frac{\partial J_{ij}}{\partial s} = -\kappa_j J_{ij} + \kappa_j J_{bij} \quad (4.49)$$

sendo que o coeficiente de absorção κ_j é calculado pela seguinte equação:

$$\kappa_j = N \sqrt{C_j C_{j-1}} \quad (4.50)$$

onde N é a densidade molecular, em unidades de molec./cm³, calculada pela seguinte expressão:

$$N = \frac{7,34143 \times 10^{21}}{T} \quad (4.51)$$

E a condição de contorno considerando uma superfície negra é:

$$J_{ij}(s_w, \hat{\Omega}) = J_{bij}(T_w) \quad (4.52)$$

Existem outros modelos para descrever o comportamento do coeficiente de absorção dos gases em meios participantes. Dentre eles, destaca-se o método FSK e seus variantes, desenvolvido por Modest e Zhang, 2002, que não serão discutidos nesse trabalho. Maiores informações a respeito de modelos espectrais podem ser encontradas em Siegel e Howell, 2002.

5 ESQUEMAS NUMÉRICOS E MODELOS COMPUTACIONAIS

Nesse capítulo, são discutidos os detalhes computacionais e os métodos numéricos usados na solução das equações governantes em um processo de combustão em chamas laminares.

Assim, para encontrar a solução das equações da conservação de massa, da quantidade de movimento nas direções axial e radial, da equação da energia e da equação de conservação das espécies químicas, convém escrevê-las em função de uma variável genérica, onde em coordenadas cilíndricas axissimétricas tem a forma:

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\Phi)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho v\Phi)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r\Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial r} \right] + S^\Phi \quad (5.1)$$

onde ρ representa a massa específica, u e v são os componentes do vetor velocidade nas direções axial e radial, respectivamente. A variável genérica Φ pode representar a velocidade, as espécies, a entalpia, etc. O termo Γ^Φ é o coeficiente difuso e assume valores específicos para cada caso, assim como o termo fonte genérico S^Φ . A Tabela 5.1 apresenta os valores específicos do coeficiente difuso Γ^Φ e do termo fonte S^Φ assumem para a equação da conservação de massa, da quantidade de movimento, das espécies e da energia.

A Equação 5.1 é comumente escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \frac{\partial J_z}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rJ_r)}{\partial r} = S^\Phi \quad (5.2)$$

onde

$$J_z = \rho u\Phi - \Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial z} \quad (5.3)$$

e

$$J_r = \rho v\Phi - \Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial r} \quad (5.4)$$

são vistos como fluxo total da variável genérica Φ .

Tabela 5.1 – Valores específicos que o coeficiente difuso (Γ^Φ) e o termo fonte (S^Φ) assumem na equação genérica do transporte.

Equação	Φ	Γ^Φ	S^Φ
Conservação de massa	1	0	0
Quantidade de movimento na direção axial	u	μ	$-\frac{\partial p}{\partial z} + (\rho_0 - \rho)g + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{\mu}{r} \frac{\partial v}{\partial z}$ $-\frac{2}{3} \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{v}{r} \right) \right]$
Quantidade de movimento na direção radial	v	μ	$-\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) - 2\mu \frac{v}{r^2} -$ $\frac{2}{3} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{v}{r} \right) \right]$
Espécies	Y_i	ρD_i	\dot{r}_i
Energia	h	k/c_p	$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \sum_i h_i \left(\rho D_i - \frac{k}{c_p} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right) +$ $\frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_i h_i \left(\rho D_i - \frac{k}{c_p} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial z} \right) - \nabla \cdot \bar{q}_R$

5.1 O Método dos Volumes Finitos em Coordenadas Cilíndricas Axissimétricas

Dividindo-se o domínio de cálculo em volumes de controle, conforme pode ser visto na Figura 5.1, e aplicando-se o método dos volumes finitos para discretizar a Equação 5.2, obtém-se a forma simplificada representada pela Equação 5.5.

$$a_P \Phi_P = a_E \Phi_E + a_W \Phi_W + a_N \Phi_N + a_S \Phi_S + b \quad (5.5)$$

onde Φ é a variável genérica e os coeficiente são:

$$a_E = D_e - F_e / 2 \quad (5.6)$$

$$a_W = D_w + F_w / 2 \quad (5.7)$$

$$a_N = D_n - F_n / 2 \quad (5.8)$$

$$a_S = D_s + F_s / 2 \quad (5.9)$$

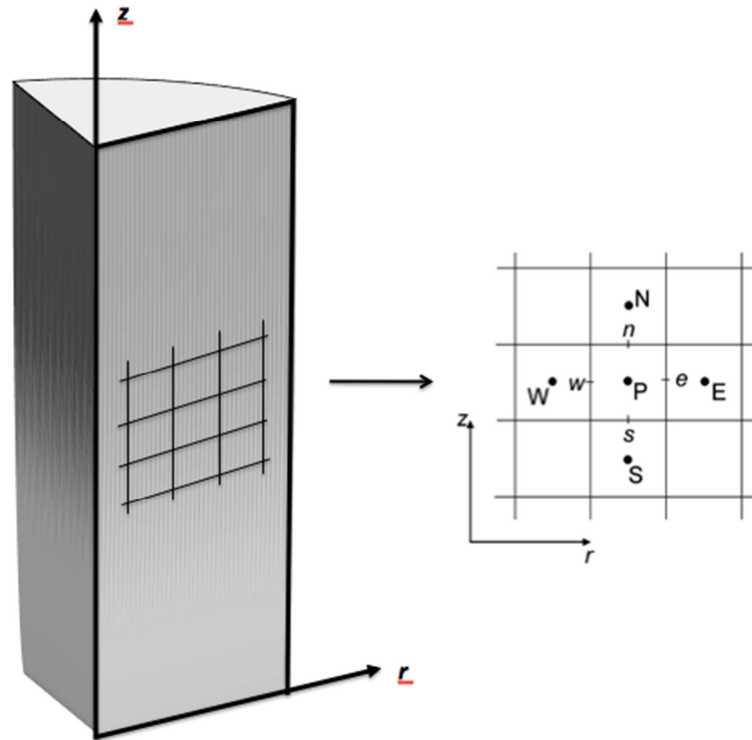


Figura 5.1 – Modelo de discretização.

onde F indica a intensidade dos termos convectivos enquanto D indica a intensidade dos termos difusos. Dependendo da direção do escoamento, F pode assumir valores positivos ou negativos, enquanto D é sempre positivo. Esses coeficientes são definidos da seguinte maneira:

$$D_i = \frac{\Gamma_i r_i \Delta z}{(\delta r)_i} \text{ para } i = e, w \quad (5.10)$$

$$D_i = \frac{\Gamma_i r_i \Delta r}{(\delta z)_i} \text{ para } i = n, s \quad (5.11)$$

$$F_i = (\rho v)_i r_i \Delta z \text{ para } i = e, w \quad (5.12)$$

$$F_i = (\rho u)_i r_i \Delta r \text{ para } i = n, s \quad (5.13)$$

O termo b da Equação 5.5 é dado por:

$$b = S_C \Delta V + a_p^o \Phi_p^o \quad (5.14)$$

onde

$$a_p^o = \frac{\rho_p^o \Delta V}{\Delta t} \quad (5.15)$$

e

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S + F_e - F_w + F_n - F_s + a_p^o - S_p \Delta V \quad (5.16)$$

o super-índice o indica os valores conhecidos no tempo t , enquanto os demais valores são as incógnitas no tempo $t + \Delta t$. Os termos S_C e S_P referem-se ao termo fonte S^Φ da Equação 5.2.

5.2 Esquemas de Interpolação

Para resolver a Equação 5.5 é necessário calcular o transporte da propriedade Φ nas faces n , s , e e w representadas na Figura 5.1. Para calcular esses valores nas equações da quantidade de movimento, usou-se o esquema conhecido como QUICK, detalhado na seção 5.2.1, enquanto que nas demais equações foi usado o esquema híbrido, na seção 5.2.2.

5.2.1 QUICK

O esquema QUICK (sigla em inglês para *Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics*), apresentado por Leonard, 1979, faz uma interpolação quadrática usando três pontos para obter o valor de ϕ na face. Essa expressão pode ser deduzida a partir da esquematização da Figura 5.2.

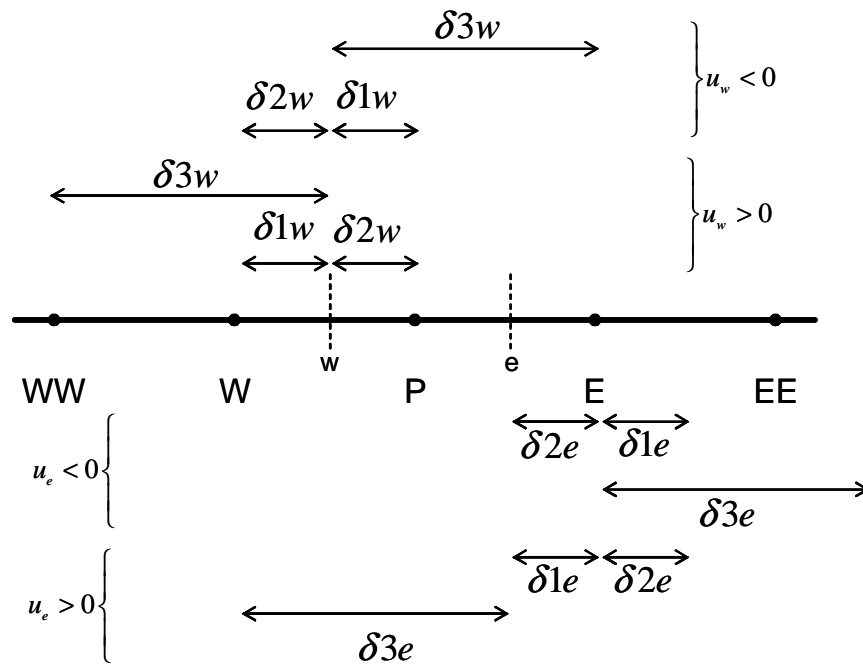


Figura 5.2 – Parâmetros envolvidos na dedução da forma generalizada para interpolação na direção x .

Neste esquema, usa-se um polinômio de segundo grau na interpolação, da seguinte forma:

$$\phi_w = a_0 + a_1(x - x_p) + a_2(x - x_p)(x - x_w) \quad (5.17)$$

satisfazendo às seguintes condições:

$$\begin{aligned} x = x_p &\rightarrow \phi_w = \phi_p \\ x = x_w &\rightarrow \phi_w = \phi_w \\ x = x_{ww} &\rightarrow \phi_w = \phi_{ww} \end{aligned} \quad (5.18)$$

as quais permitem determinar os valores dos coeficientes a_0 , a_1 e a_2 . Com algumas manipulações algébricas, obtemos:

$$\begin{aligned} \phi_w = & \frac{\delta_{2w}}{\delta_{1w} + \delta_{2w}} \phi_w + \frac{\delta_{1w}}{\delta_{1w} + \delta_{2w}} \phi_p + \\ & - \frac{\delta_{1w} \delta_{2w}}{(\delta_{1w} + \delta_{2w})(\delta_{2w} + \delta_{3w})} \left(\phi_p - \frac{\delta_{2w} + \delta_{3w}}{\delta_{3w} - \delta_{1w}} \phi_w + \frac{\delta_{1w} + \delta_{2w}}{\delta_{3w} - \delta_{1w}} \phi_{ww} \right) \end{aligned} \quad (5.19)$$

Definindo os seguintes parâmetros geométricos,

$$\begin{aligned}\alpha_{1w} &= \frac{\delta_{1w}}{\delta_{1w} + \delta_{2w}}; \beta_{1w} = \frac{\delta_{1w} + \delta_{2w}}{\delta_{3w} - \delta_{1w}}; \alpha_{2w} = \frac{\delta_{2w}}{\delta_{1w} + \delta_{2w}}; \\ \beta_{2w} &= \frac{\delta_{2w} + \delta_{3w}}{\delta_{3w} - \delta_{1w}}; q_w = \frac{\delta_{2w}}{\delta_{2w} + \delta_{3w}} \alpha_{1w}.\end{aligned}\quad (5.20)$$

obtem-se uma equação para $u_w > 0$.

$$\phi_w = \alpha_{2w} \phi_W + \alpha_{1w} \phi_P - q_w (\phi_P - \beta_{2w} \phi_W + \beta_{1w} \phi_{WW}) \quad (5.21)$$

Considerando os parâmetros da Figura 5.2, a seguinte expressão pode ser obtida similarmente, quando $u_w < 0$.

$$\phi_w = \alpha_{1w} \phi_W + \alpha_{2w} \phi_P - q_w (\phi_W - \beta_{2w} \phi_P + \beta_{1w} \phi_E) \quad (5.22)$$

As Equações 5.21 e 5.22 podem ser agrupadas da seguinte forma:

$$\begin{aligned}F_w \phi_w &= (\alpha_{2w} \phi_W + \alpha_{1w} \phi_P - q_w (\phi_P - \beta_{2w} \phi_W + \beta_{1w} \phi_{WW})) F_w^+ \\ &+ (\alpha_{1w} \phi_W + \alpha_{2w} \phi_P - q_w (\phi_W - \beta_{2w} \phi_P + \beta_{1w} \phi_E)) F_w^-\end{aligned}\quad (5.23)$$

onde $F_w = \rho u_w A_w$ é a taxa de fluxo de massa na face w do volume de controle e $F_w \phi_w$ é o fluxo convectivo global e,

$$F_w^+ = \frac{F_w + |F_w|}{2}; \quad F_w^- = \frac{F_w - |F_w|}{2} \quad (5.24)$$

Para a face leste, tem-se:

$$\begin{aligned}F_e \phi_e &= (\alpha_{1e} \phi_E + \alpha_{2e} \phi_P - q_e (\phi_E - \beta_{2e} \phi_P + \beta_{1e} \phi_W)) F_e^+ \\ &+ (\alpha_{2e} \phi_E + \alpha_{1e} \phi_P - q_e (\phi_P - \beta_{2e} \phi_E + \beta_{1e} \phi_{EE})) F_e^-\end{aligned}\quad (5.25)$$

onde as definições para os tamanhos da malha δ_{ie} são encontradas na Figura 5.2. Os parâmetros α_{ie} , β_{ie} e q_e têm forma similar aos da Equação 5.20.

Estendendo similarmente este conceito para o caso bi-dimensional, temos que:

$$F_s \phi_s = (\alpha_{2s} \phi_s + \alpha_{1s} \phi_p - q_s (\phi_p - \beta_{2s} \phi_s + \beta_{1s} \phi_{SS})) F_s^+ + (\alpha_{1s} \phi_s + \alpha_{2s} \phi_p - q_s (\phi_s - \beta_{2s} \phi_p + \beta_{1s} \phi_N)) F_s^- \quad (5.26)$$

$$F_n \phi_n = (\alpha_{1n} \phi_n + \alpha_{2n} \phi_p - q_n (\phi_n - \beta_{2n} \phi_p + \beta_{1n} \phi_s)) F_n^+ + (\alpha_{2n} \phi_n + \alpha_{1n} \phi_p - q_n (\phi_p - \beta_{2n} \phi_n + \beta_{1n} \phi_{NN})) F_n^- \quad (5.27)$$

5.2.2 Híbrido

Segundo Patankar, 1980, a divisão dos coeficientes a_I ($I = E, W, N$ ou S) pela respectiva intensidade dos termos difusos D_i ($i=e, w, n$ ou s) é proporcional ao número de Peclet, com a seguinte relação:

$$\frac{a_E}{D_e} = \frac{Pe_e}{\exp(Pe_e) - 1}, \quad \frac{a_W}{D_w} = \frac{Pe_w}{\exp(Pe_w) - 1}, \quad \frac{a_N}{D_n} = \frac{Pe_n}{\exp(Pe_n) - 1}, \quad \frac{a_S}{D_s} = \frac{Pe_s}{\exp(Pe_s) - 1} \quad (5.28)$$

onde

$$Pe_i = \frac{F_i}{D_i} \text{ para } i = n, s, e, w \quad (5.29)$$

sendo que F_i e D_i foram definidos nas Equações 5.10 à 5.13.

A Figura 5.3 mostra a variação de a_E/D_e para diferentes números de Peclet. No esquema híbrido, as Equações 5.28 são aproximadas por três funções lineares. Uma para $Pe < -2$, outra para $-2 \leq Pe \leq 2$ e outra para $Pe > 2$, onde:

$$\begin{cases} \frac{a_I}{D_i} = -Pe_i & \text{se } Pe_i < -2 \\ \frac{a_I}{D_i} = 1 - \frac{Pe_i}{2} & \text{se } -2 \leq Pe_i \leq 2 \\ \frac{a_I}{D_i} = 0 & \text{se } Pe_i > 2 \end{cases} \quad (5.30)$$

onde $I = E, W, N, S$ e $i = e, w, n, s$, respectivamente.

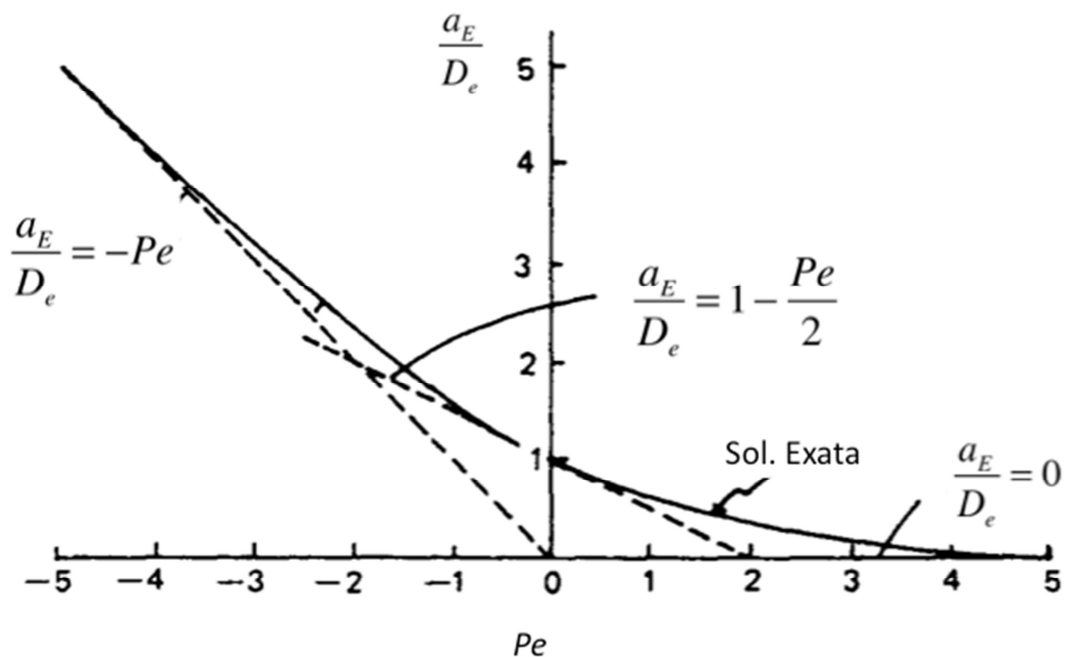


Figura 5.3 – Variação do coeficiente a_E com o número de Peclet [Patankar, 1980].

Assim, no esquema híbrido, os coeficientes a_I da Equação 5.5 são substituídos por:

$$a_I = \max \left[-F_i, D_i - \frac{F_i}{2}, 0 \right] \quad (5.31)$$

5.3 Acoplamento da Pressão com a Velocidade

A convecção da variável escalar ϕ depende da magnitude e da direção do campo de velocidade local. Como o campo de velocidades deve satisfazer às equações do momento e da continuidade, o gradiente de pressão que aparece nas equações do momento, sendo a principal

fonte de movimento na maioria dos escoamentos importantes na engenharia, é escrito separadamente, para facilitar sua discussão que será tratada nesta seção.

Na literatura, existem alguns métodos que acoplam o gradiente de pressão às equações da quantidade de movimento satisfatoriamente. Entre eles, os mais conhecidos são o SIMPLE e seus derivados (SIMPLER e SIMPLEC) detalhados por Patankar, 1980, e o método de projeção da pressão desenvolvido por [Peyret e Taylor, 1983].

Neste trabalho, utiliza-se o método de projeção da pressão, que consiste em dividir as equações da quantidade de movimento em duas partes: a primeira considera os efeitos convectivos, as forças de campo e os efeitos difusos, e a segunda parte apenas os efeitos do gradiente de pressão.

Discretizando a derivada temporal e representando todos os demais termos, exceto o gradiente de pressão, pelo vetor \vec{R} , e equação da quantidade de movimento pode ser escrita como:

$$\frac{(\rho\vec{V})^{n+1} - (\rho\vec{V})^n}{\Delta t} = \nabla P + \vec{R} \quad (5.32)$$

O vetor velocidade \vec{V} pode ser escrito como a soma de dois outros vetores

$$\vec{V} = \vec{V}^* + \vec{V}' \quad (5.33)$$

onde \vec{V}^* é o vetor velocidade sem os efeitos do gradiente de pressão e \vec{V}' é o corrigido pelo gradiente de pressão no instante $n+1$. Usando a Equação 5.33, a Equação 5.32 pode ser escrita como:

$$\frac{(\rho\vec{V}^*)^{n+1} - (\rho\vec{V})^n}{\Delta t} = \vec{R} \quad (5.34)$$

$$\frac{(\rho\vec{V}')^{n+1}}{\Delta t} = \nabla P \quad (5.35)$$

Para resolver o problema de fechamento do sistema formado pelas Equações 5.34 e 5.35, usa-se a equação da continuidade, que pode ser escrita como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \vec{V} = 0 \quad (5.36)$$

Discretizando-se a derivada temporal e substituindo na Equação 5.33, obtém-se:

$$\frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\Delta t} + \nabla (\rho \vec{V}^*)^{n+1} = -\nabla (\rho \vec{V}')^{n+1} \quad (5.37)$$

Das Equações 5.35 e 5.37, obtém-se

$$\frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\Delta t} + \nabla (\rho \vec{V}^*)^{n+1} = -\Delta t \nabla P \quad (5.38)$$

que é conhecida como equação de Poisson. As Equações 5.34 e 5.35 são resolvidas iterativamente, enquanto que a Equação 5.38 é resolvida de modo direto usando a fatoração LU.

5.4 Solução do Sistema de Equações Gerado pelo Método dos Volumes Finitos

Nas seções anteriores, foi discutida a discretização das equações governantes do escoamento, da transferência de calor e das espécies químicas. Esse processo resulta em um sistema linear de equações algébricas que precisa ser resolvido. A complexidade e o tamanho do conjunto de equações dependem, principalmente, do número de volumes usados na malha e dos métodos utilizados para descrever os termos convectivos e o acoplamento da pressão.

Existem duas técnicas para resolver este tipo de equação: métodos diretos, como por exemplo, o método de Cholesky, a decomposição LU e a eliminação Gaussiana; e métodos indiretos, conhecidos por métodos iterativos, que são baseados na repetição de um algoritmo relativamente simples até que a convergência seja obtida.

Neste trabalho, para a resolução do sistema de equações algébricas resultantes, foi empregado o algoritmo TDMA (*Tri-Diagonal Matrix Algorithm*) com correção em bloco [Patankar, 1980]. Para problemas unidimensionais este algoritmo é um método direto, pois a

matriz quadrada do sistema gerado é uma matriz banda tri-diagonal. Já para problemas multidimensionais, torna-se um método iterativo, como no caso bi-dimensional, pois a matriz quadrada que é gerada é pentadiagonal. Em problemas bi e tri-dimensionais, o TDMA é aplicado linha por linha, varrendo todo o domínio de cálculo. Ainda a convergência freqüentemente pode ser acelerada alternando as direções de varredura de modo que as informações das fronteiras são incorporadas aos cálculos de maneira mais eficiente. No caso bi-dimensional, esta técnica é implementada através de quatro varreduras alternadas: norte-sul, sul-norte, leste-oeste, oeste-leste.

5.5 Discretização da Equação do Transporte Radiante

Para resolver a equação do transporte radiante, foi usado o método das ordenadas discretas para discretizar a Equação 3.54. Esta seção demonstra como foi feita essa discretização e como foi tratado o termo da derivada angular.

Em coordenadas cilíndricas axissimétricas, a discretização das equações através das ordenadas discretas é complicada devido à presença do termo com derivada angular $\eta(\partial I / \partial \varphi)$. Carlson e Lathrop, 1968, propuseram uma técnica de diferenciação direta para o cálculo desse termo nos pontos da quadratura, da seguinte forma:

$$\eta \frac{\partial I}{\partial \varphi} = \frac{\alpha_{m+1/2} I_{P,m+1/2} - \alpha_{m-1/2} I_{P,m-1/2}}{w_m} \quad (5.39)$$

onde o ponto P é o centro do volume de controle, e as direções $m \pm 1/2$ definem suas fronteiras na direção radial. O termo do numerador do lado direito da Equação 5.39 representa a saída e entrada de intensidade no volume de controle, respectivamente. Como os volumes de controle na direção radial não são constantes, os coeficientes geométricos $\alpha_{m \pm 1/2}$ também não são constantes e são determinados pela seguinte expressão:

$$\alpha_{m+1/2} = \alpha_{m-1/2} - w_m \mu_m \quad (5.40)$$

onde o primeiro $\alpha_{m-1/2}$ é nulo em cada nível ξ .

A integração do primeiro termo da a Equação 3.54 sobre o volume de controle mostrado na Figura 5.1, é feita da seguinte forma:

$$\int_V \frac{\partial I_m}{\partial \rho} dV = \int_{A_e} I_m dA_e - \int_{A_w} I_m dA_w = A_e I_{e,m} - A_w I_{w,m} \quad (5.41)$$

onde os termos $I_{e,m}$ e $I_{w,m}$ são os valores de I_m nas faces A_e e A_w respectivamente. Realizando-se o mesmo processo para os outros termos e utilizando-se a Equação 5.39, a Equação 3.54 torna-se:

$$\begin{aligned} & \mu_m (A_e I_{e,m} - A_w I_{w,m}) + \xi_m (A_n I_{n,m} - A_s I_{s,m}) + \\ & (A_e - A_w) \frac{\alpha_{m+1/2} I_{P,m+1/2} - \alpha_{m-1/2} I_{P,m-1/2}}{w_m} = -\kappa V_P I_{P,m} + \kappa V_P I_{b,P} \end{aligned} \quad (5.42)$$

A Equação 5.42 forma um sistema com mais variáveis que equações. Além disso, a solução requer esquemas de diferenciação para avaliar as intensidades nos volumes de controle e nas faces. Essas equações possuem a seguinte forma:

$$\lambda I_{w,m} + (1 - \lambda) I_{e,m} = I_{P,m} \text{ para } \mu < 0 \quad (5.43)$$

$$\chi I_{s,m} + (1 - \chi) I_{n,m} = I_{P,m} \text{ para } \xi < 0 \quad (5.44)$$

$$\zeta I_{P,m+1/2} + (1 - \zeta) I_{P,m-1/2} = I_{P,m} \quad (5.45)$$

A Equação 5.45 é válida para todas as direções enquanto que as Equações 5.43 e 5.44 devem ser reescritas quando o cosseno mudar de sinal. Considerando-se os valores de λ , χ e ζ iguais a 0,5, assume-se uma variação linear da intensidade em cada volume de controle. Carlson e Lathrop, 1968, reportaram que essa escolha é instável e pode resultar em soluções negativas para as intensidades. Se for considerado que $\lambda = \chi = \zeta = 1$, isto é, um esquema de diferenciação do tipo escada, a solução não sofre com esse problema, mas uma discretização muito refinada deve ser feita para a obtenção de soluções independentes da malha. Um

esquema que garante valores positivos para as intensidades foi desenvolvido por Jendoubi, 1991, onde as equações requeridas para $\mu > 0$ e $\xi > 0$ são:

$$1 - \lambda' = \frac{\mu_m A_w}{2\xi_m A_n + 2(A_e - A_w)\alpha_{m+1/2} / w_m + \beta V_P} \quad (5.46)$$

$$1 - \chi' = \frac{\xi_m A_s}{2\mu_m A_e + 2(A_e - A_w)\alpha_{m+1/2} / w_m + \beta V_P} \quad (5.47)$$

$$1 - \zeta' = \frac{(A_e - A_w)\alpha_{m+1/2} / w_m}{2\mu_m A_e + 2\xi_m A_n + \beta V_P} \quad (5.48)$$

Equações semelhantes são requeridas para valores negativos de μ e ξ . Então, os coeficientes λ , χ e ζ são escolhidos da seguinte forma:

$$\lambda = \max(\lambda'; 0,5) \quad (5.49)$$

$$\xi = \max(\xi'; 0,5) \quad (5.50)$$

$$\zeta = \max(\zeta'; 0,5) \quad (5.51)$$

Os valores iniciais para $I_{m-1/2}$ para cada nível ξ são considerados iguais ao primeiro $I_{p,m}$ para cada volume de controle.

5.6 O método das ordenadas discretas

O método das ordenadas discretas é uma extensão do método dos dois fluxos (S-2), proposto independentemente por Schuster, 1905, e Schwarzschild, 1906, para o estudo da transferência radiante em atmosferas estelares, e estendido por Chandrasekhar, 1960, para o uso em espalhamentos anisotrópicos. Quando o ângulo sólido é dividido em mais que dois hemisférios, o método é conhecido como ordenadas discretas (S-N).

Esse método é uma técnica numérica que resolve a equação do transporte radiante, transformando-a em um conjunto de equações diferenciais, onde N é a ordem da solução e seu valor indica o número de diferentes cossenos diretores usados para cada direção principal. Em problemas tridimensionais, cada octante de uma esfera de ângulos sólidos em torno de um ponto da malha contém $N(N+2)/8$ ordenadas onde, para cobrir todo o domínio de ângulos sólidos, deve ser resolvido $N(N+2)$ equações simultâneas em cada ponto da malha. Um esquema das direções usadas no primeiro octante para uma solução S-8 é mostrado na Figura 5.4. O vetor que liga a origem aos pontos superficiais da esfera unitária resulta nas direções onde a equação do transporte radiante é resolvida.

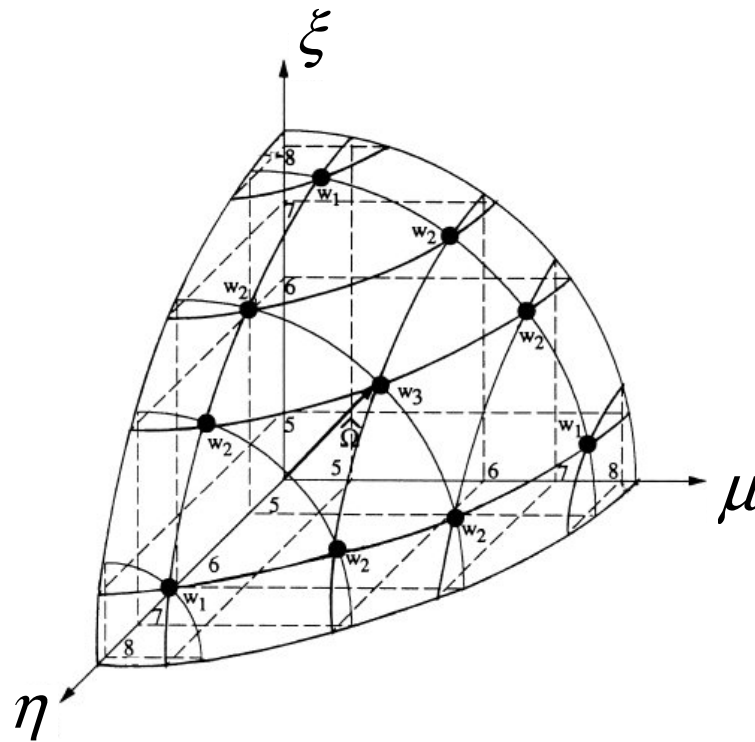


Figura 5.4 – Número de pontos para a solução S-8 no primeiro octante.

Neste trabalho foi usado a quadratura S-6. Assim, cada octante contém 6 direções e, devido a simetria, este número é reduzido à três, o que resulta em 24 diferentes direções. Os valores das direções μ e ξ , e os pesos w usados são apresentados na Tabela 5.2.

Tabela 5.2 – Direções e pesos usados pelo método das ordenadas discretas

l	$\mu(l)$	$\xi(l)$	$w(l)$	l	$\mu(l)$	$\xi(l)$	$w(l)$	l	$\mu(l)$	$\xi(l)$	$w(l)$
1	$-c_1$	$-c_3$	$\pi/6$	9	$-c_1$	$-c_1$	$\pi/6$	17	c_2	c_1	$\pi/6$
2	c_1	$-c_3$	$\pi/6$	10	c_1	$-c_1$	$\pi/6$	18	c_3	c_1	$\pi/6$
3	$-c_2$	$-c_2$	$\pi/6$	11	c_2	$-c_1$	$\pi/6$	19	$-c_2$	c_2	$\pi/6$
4	$-c_1$	$-c_2$	$\pi/6$	12	c_3	$-c_1$	$\pi/6$	20	$-c_1$	c_2	$\pi/6$
5	c_1	$-c_2$	$\pi/6$	13	$-c_3$	c_1	$\pi/6$	21	c_1	c_2	$\pi/6$
6	c_2	$-c_2$	$\pi/6$	14	$-c_2$	c_1	$\pi/6$	22	c_2	c_2	$\pi/6$
7	$-c_3$	$-c_1$	$\pi/6$	15	$-c_1$	c_1	$\pi/6$	23	$-c_1$	c_3	$\pi/6$
8	$-c_2$	$-c_1$	$\pi/6$	16	c_1	c_1	$\pi/6$	24	c_1	c_3	$\pi/6$

$$c_1 = 0,224556, c_2 = 0,689048, c_3 = 0,948235$$

6 CÁLCULOS DO DIVERGENTE DO FLUXO DE CALOR POR RADIAÇÃO

Neste capítulo, pretende-se analisar qual modelo para o coeficiente de absorção dos gases deve ser usado na equação do transporte radiante para se obter o divergente do fluxo radiante em cálculos de combustão.

Nesse estudo, foram analisados quatro modelos diferentes: o modelo do gás cinza, o modelo WSGG, o SLW e o CW, além de um modelo para a obtenção de resultados usando integração linha-por-linha, que servirá para validar os outros modelos. Para dar seqüência ao trabalho, neste capítulo é feita uma comparação entre os resultados existentes na literatura e os obtidos pelos modelos analisados, para fins de validação.

Uma descrição de cada caso estudado neste capítulo é feita a seguir:

Caso 1. É considerado um meio homogêneo e não-isotérmico, onde o gás que preenche o espaço entre duas placas infinitas distantes 2 m é o vapor d'água com uma concentração volumétrica de 10%. O perfil de temperatura ao longo do gás é cossenoidal, variando de 1500 K a 500 K, de acordo com a seguinte equação:

$$T(x) = 1000 + 500 \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (6.1)$$

onde x é a posição entre as placas e L é a distância entre elas, neste caso $L=2$.

Caso 2. É considerado um meio homogêneo e não-isotérmico, onde o gás que preenche o espaço entre duas placas infinitas distantes 1 m é o dióxido de carbono com uma concentração volumétrica de 10%. O perfil de temperatura entre as placas é parabólico e simétrico, onde a temperatura das paredes é de 500 K e a temperatura no centro é de 1000 K, conforme a seguinte equação:

$$T(x) = 1000 - 500 \left(\frac{2x}{L} - 1\right)^2 \quad (6.2)$$

onde x é a posição entre as placas e L é a distância entre elas, neste caso $L=1,0$ m.

Caso 3. Considerando-se a mesma geometria descrita no caso 2 e um meio homogêneo formado por uma mistura composta por 10% CO₂, 10% H₂O e 80% N₂, onde a temperatura varia entre as placas de acordo com a Equação 6.3.

$$T(x) = 2000 - 1500 \left(\frac{2x}{L} - 1 \right)^2 \quad (6.3)$$

Caso 4. O mesmo problema descrito no Caso 3, com a mesma mistura de gases e o mesmo perfil de temperatura, onde a única diferença é a distância entre as placas que foi reduzida de 1 m para 1,0 cm, tendo por finalidade simular um meio opticamente fino, uma vez que a composição do meio foi mantida, e a distância entre as placas reduzida.

Começando pelo modelo LBL, a comparação foi feita com um resultado apresentado por Modest et al., 2000, o qual resolveu um problema unidimensional considerando um meio como o descrito no Caso 2. Nas simulações, Modest utilizou o banco de dados HITRAN96. Como o banco de dados HITRAN96 não está mais disponível, pois foi atualizado, comparamos o resultado com a utilização dos bancos de dados HITRAN04 e HITEMP, sendo que os resultados para este caso estão apresentados na Figura 6.1.

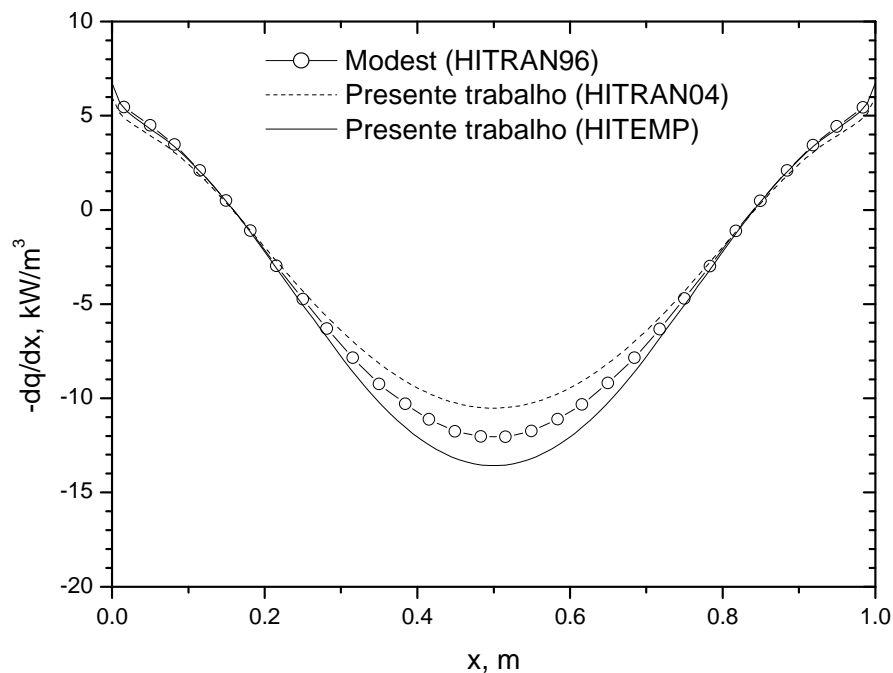
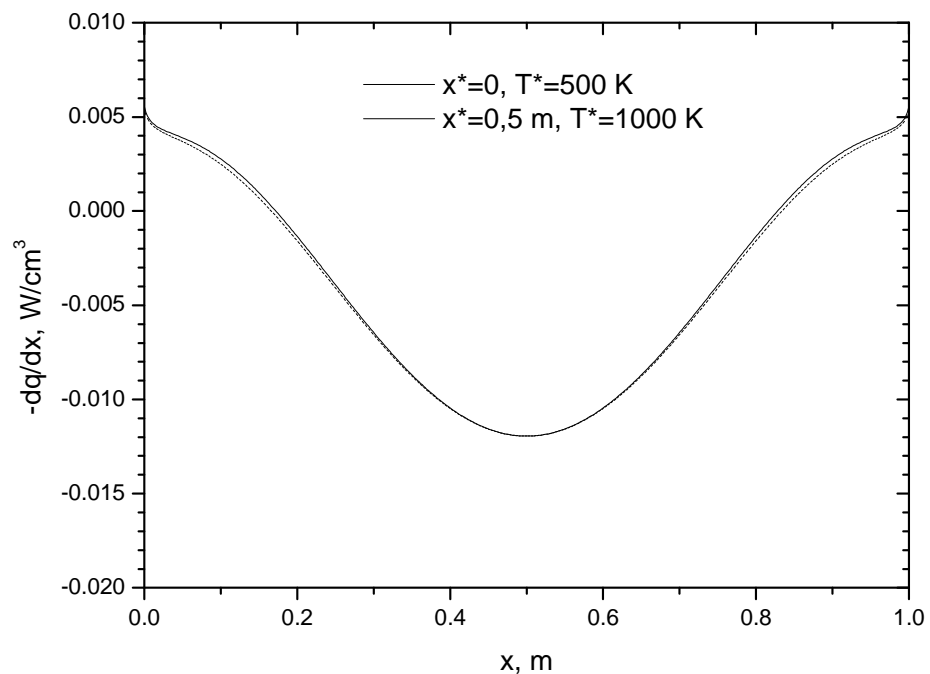


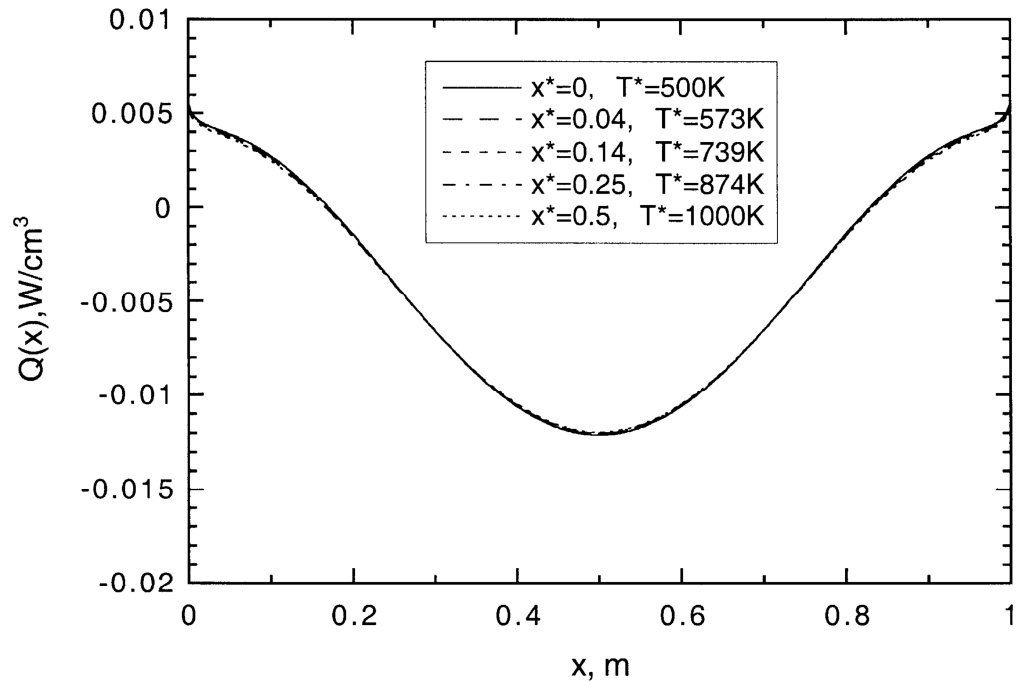
Figura 6.1 – Comparação entre os resultados com o método LBL.

Conforme pode ser visto na Figura 6.1, existe uma dependência dos resultados em relação ao tipo de banco de dados usado (HITRAN04 e HITEMP), isso explica a diferença entre os resultados obtidos e o apresentado por Modest, que usou o HITRAN96. Não foi encontrado na literatura resultados empregando a integração LBL obtidos com os bancos de dados disponíveis atualmente, mas, considerando-se a coerência nos resultados, os testes de independência de malha e a verificação do balanço de energia, acredita-se que os resultados obtidos pelo método LBL são confiáveis e podem ser utilizados na comparação com os demais métodos, para que seja testada a eficiência dos modelos.

Para a validação da rotina que utiliza o método CW, a comparação foi feita com o resultado apresentado por Solovjov e Webb, 2002, onde foi considerado o meio descrito no Caso 2. Os resultados foram obtidos exatamente para as mesmas condições usadas por Solovjov e Webb, 2002, isto é, utilizando o banco de dados HITEMP, empregando uma malha com 500 volumes uniformemente espaçados entre as placas, considerando 10 seções transversais constantes e 30 direções com o método das ordenadas discretas. As comparações estão mostradas nas Figura 6.2 (a) e 6.2 (b), apresentando uma concordância muito satisfatória com os obtidos pelos autores.



a) presente trabalho



b) Solovjov e Webb, 2002

Figura 6.2 – Comparação entre os resultados obtidos pelo método CW.

Para a validação da rotina que utiliza o método SLW, foi feito um código baseado nas correlações apresentadas por Denison e Webb, 1993, para a função ALB, e a comparação foi feita com o resultado apresentado por Denison e Webb, 1995, onde o meio considerado é como o apresentado no caso 1.

Como pode ser visto na Figura 6.3, a comparação entre os resultados obtidos por Denison e Webb, 1995 e o presente trabalho mostra boa concordância, onde a diferença observada na região em que x está próximo de 1,5 m pode ser uma questão de malha ou do número de seções transversais constantes utilizados, pois esses dados não são informados pelos autores.

As correlações para a função distribuição ALB foram construídas a partir dos espectros criados com o banco de dados HITRAN92, elas estão desatualizadas e já não tem a capacidade de resolver os problemas atuais com a precisão necessária. Devido a este fato, outro código foi desenvolvido para a resolução dos problemas com o método SLW, onde a função distribuição ALB foi recalculada baseada nos bancos de dados espectrais atuais. A diferença pode ser vista na Figura 6.4, onde o problema descrito no Caso 2 foi resolvido com o método SLW de duas maneiras: uma considerando as correlações apresentadas por Denison e Webb, 1993, e outra calculando a função distribuição ALB baseada nos espectros criados

pelo banco de dados HITRAN04. Como pode ser visto, à medida que a temperatura aumenta, a diferença entre os resultados se acentua, chegando a 38% no centro da placa, onde a temperatura é de 1000 K. Devido a essa diferença, as correlações apresentadas por Denison e Webb não serão usadas nesse trabalho e a função distribuição ALB será recalculada usando o banco de dados HITRAN2004.

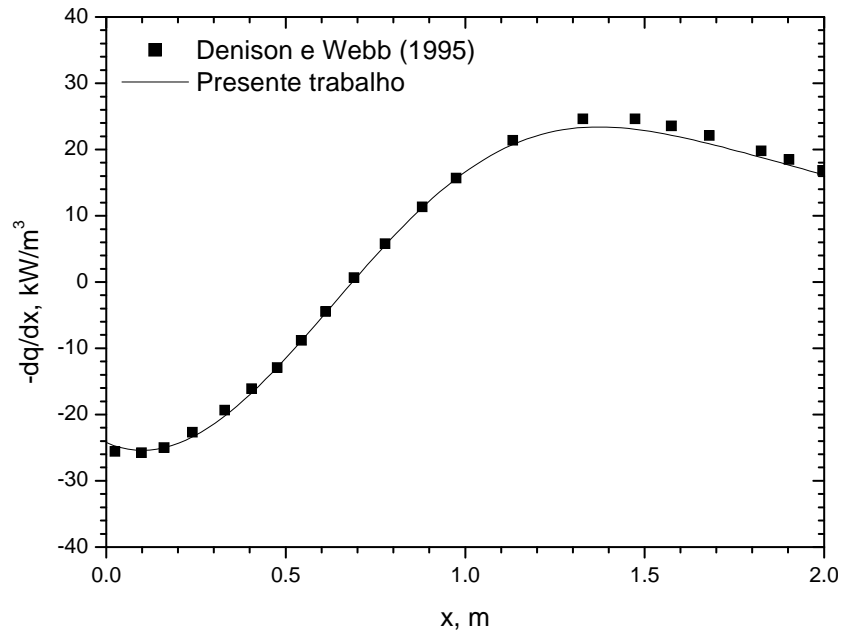


Figura 6.3 – Comparação entre os Resultados obtidos por Denison e Webb, 1995, e o presente trabalho utilizando o método SLW.

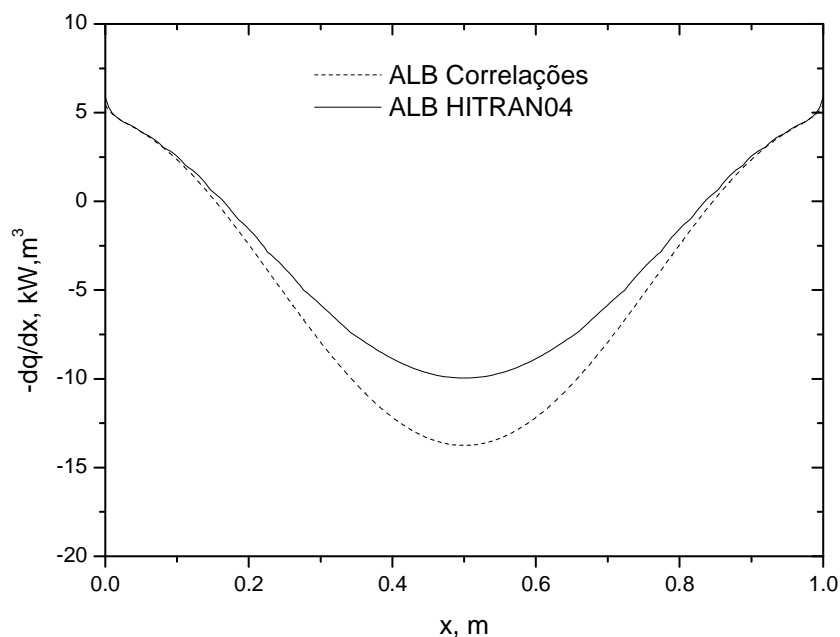


Figura 6.4 – Comparação entre os resultados obtidos com o método SLW.

Testes realizados com o modelo WSGG (descrito na seção 4.3), mostraram que o modelo não é capaz de estimar o divergente do fluxo radiante com a mesma exatidão obtida pelos modelos espectrais mais avançados SLW e CW. Por outro lado, o modelo WSGG apresenta uma boa relação custo/benefício, pois é mais confiável que o modelo do gás cinza, especialmente considerando-se meios que não são opticamente finos, e o tempo computacional necessário para obter a solução é consideravelmente menor que o requerido pelos modelos CW e SLW. Uma desvantagem desse modelo se deve ao fato de que as correlações usadas para o coeficiente de absorção e para os pesos [Smith et al., 1982] estão desatualizadas, pois foram obtidas com base em um dos primeiros banco de dados espectrais. Assim, com o intuito de obter melhores resultados com esse modelo, foram obtidas novas correlações, nos mesmos moldes das obtidas por Smith, mas baseadas no banco de dados HITEMP. As novas correlações estão apresentadas na Tabela 6.1.

Tabela 6.1 – Valores do coeficiente de absorção e dos coeficientes polinomiais obtidos com base no banco de dados HITEMP para o modelo WSGG.

i	κ_i (1/atm.m)	$b_{i,1} \times 10^1$	$b_{i,2} \times 10^4$	$b_{i,3} \times 10^7$	$b_{i,4} \times 10^{11}$
Mistura, $P_w/P_C = 1$					
1	0,5023	4,0831	1,1982	$-7,3069 \times 10^{-3}$	-2,2417
2	9,3261	2,7241	-1,4359	$6,4469 \times 10^{-1}$	-1,5907
3	$1,8109 \times 10^2$	0,8683	$7,4289 \times 10^{-2}$	$-5,3027 \times 10^{-1}$	1,5944
Mistura, $P_w/P_C = 2$					
1	0,5240	3,6586	1,2215	0,3844	-3,3917
2	9,0553	2,5820	-0,3474	-0,3223	0,6287
3	$1,4199 \times 10^2$	1,2252	-0,5629	-0,1780	0,9547

Com base nos novos coeficientes obtidos, o modelo WSGG é testado no problema descrito no Caso 3, onde é feita uma comparação entre os novos coeficientes obtidos com o banco de dados HITEMP e os antigos coeficientes propostos por Smith et al., 1982. Ambos os resultados são comparados com cálculos linha-por-linha.

A comparação é mostrada na Figura 6.5. Como pode ser visto, os resultados obtidos com as novas correlações são mais próximos dos cálculos linha-por-linha do que os resultados obtidos pelas correlações antigas, especialmente na região de alta temperatura, onde a

diferença entre as novas correlações e os cálculos linha-por-linha são de 2% enquanto que com as antigas correlações, a diferença chega a 12%.

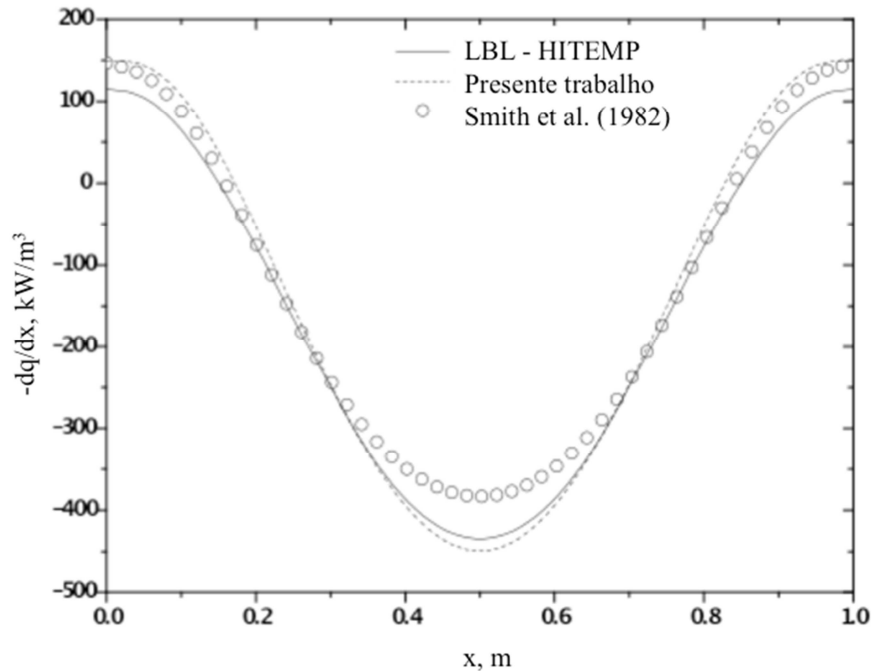


Figura 6.5 – Comparação entre os resultados obtidos com o modelo WSGG e cálculos linha-por-linha considerando o problema descrito no caso 3.

A vantagem das correlações usadas no modelo WSGG são que elas atendem a uma grande faixa de espessura óptica, variando de 0,0001 atm-m até 10 atm-m. Essa faixa atende a praticamente todas as aplicações em engenharia, porém alguns testes mostraram que os resultados não são tão próximos dos cálculos linha-por-linha para os meios opticamente finos, mas esta questão pode ser contornada com o uso de mais de três regiões cinzas para o coeficiente de absorção. O mesmo não acontece com o modelo do gás cinza, pois as correlações apresentadas na Seção 4.2 foram obtidas com a utilização de médias de Planck, portanto são válidas apenas em meios opticamente finos, onde a emissão de radiação é muito maior que a absorção. Isso pode ser notado nas figuras a seguir, onde na primeira, o modelo do gás cinza foi aplicado ao meio descrito no Caso 3, e na segunda figura, o modelo foi aplicado ao Caso 4, que é opticamente fino.

A Figura 6.6 mostra o divergente do fluxo obtido com o modelo do gás cinza aplicado ao meio descrito no caso 3. Comparando com os cálculos linha por linha, percebe-se que o modelo do gás cinza superestima o divergente do fluxo radiante em todas as regiões do meio, isto é, onde as emissões são dominantes (regiões de maior temperatura próximas do centro) e

onde as absorções são dominantes (regiões de menor temperatura próximas das paredes). A mesma discrepância não ocorre quando o mesmo modelo é aplicado a um meio opticamente fino, como o descrito no Caso 4.

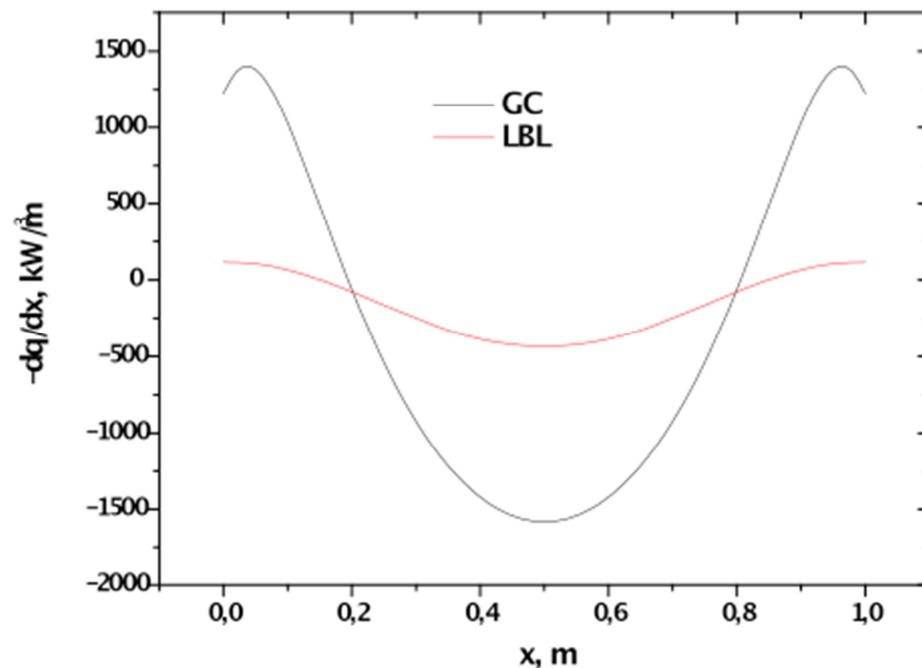


Figura 6.6 – Divergente do fluxo radiante calculado pelo modelo do gás cinza e comparado com cálculos linha-por-linha para o meio descrito no caso 3.

Como pode ser visto na Figura 6.7, o divergente do fluxo radiante calculado com o modelo do gás cinza está na mesma ordem de grandeza que o resultado obtido com os cálculos LBL. Isso se deve ao fato de que em meios opticamente finos, isto é, pequena espessura óptica, todas as regiões do meio emitem a radiação para as paredes e praticamente não absorvem, portanto o termo dominante na ETR é o κI_b , e o coeficiente de absorção médio κ usado nesse produto foi obtido através de médias de Planck, isto é, levando em consideração a intensidade do corpo negro I_b . Por outro lado, em meios que não são opticamente finos, o termo de absorção torna-se importante (κI), e o produto entre o coeficiente de absorção obtido através de médias de Planck não é o mais adequado a esse caso, uma vez que as iterações espectrais do coeficiente de absorção com a intensidade são diferentes das iterações espectrais do mesmo coeficiente de absorção com a intensidade do corpo negro.

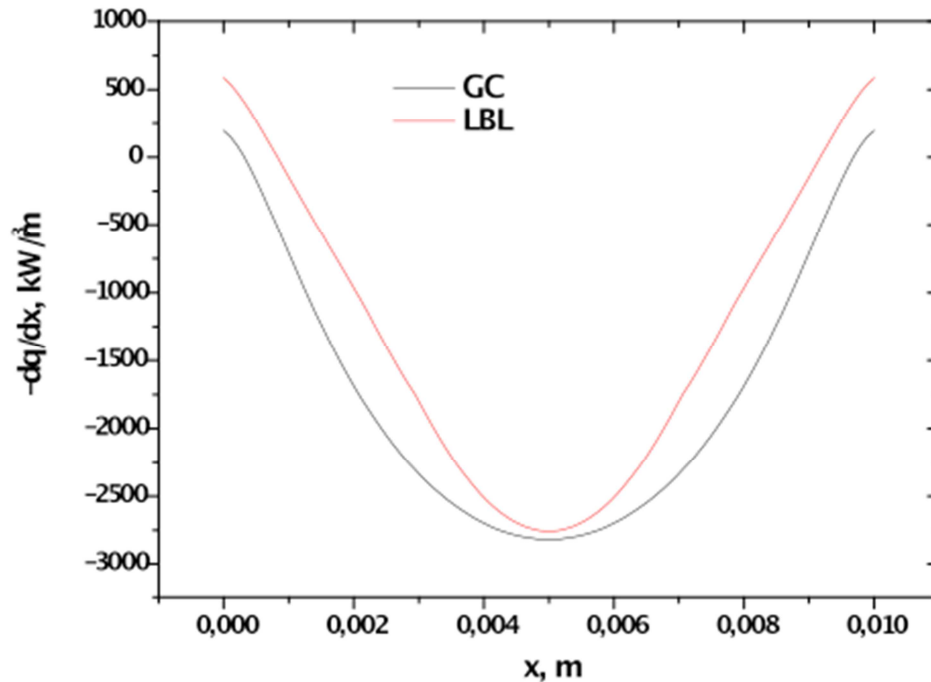


Figura 6.7 – Divergente do fluxo radiante calculado pelo modelo do gás cinza e comparado com cálculos linha-por-linha para o meio descrito no Caso 4.

Em meios espessos, o modelo do gás cinza ainda poderia ser aplicado com a utilização de médias de Rosseland para o coeficiente de absorção [Siegel e Howell, 2002], mas para todos os demais casos, esse modelo deve ser empregado cautelosamente.

Esses quatro modelos para o coeficiente de absorção dos gases (gás cinza, WSGG, SLW e CW) serão aplicados, a seguir, a um caso bi-dimensional, em coordenadas cilíndricas axissimétricas, considerando uma câmara cilíndrica com 30 cm de altura e 20 cm de diâmetro, conforme indicado na Figura 6.8. Levando-se em conta a simetria do problema, apenas metade do domínio é simulada, conforme apresentado na Figura 6.9.

Para a entrada de metano, é considerado um perfil parabólico, totalmente desenvolvido, com velocidade média de entrada de 7.9 cm/s, ao longo de um raio de 0,5 cm. A partir desse ponto, até um raio de 5 cm, é considerada uma entrada de ar com perfil uniforme a uma velocidade de 7.9 cm/s.

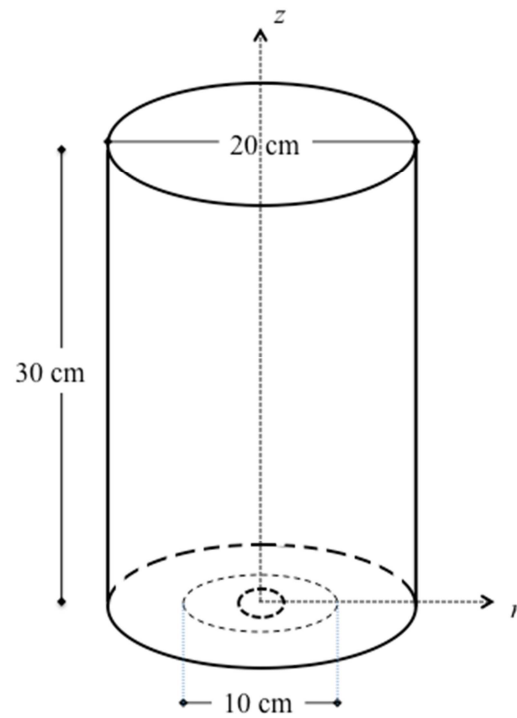


Figura 6.8 – Câmara cilíndrica considerada nesse trabalho.

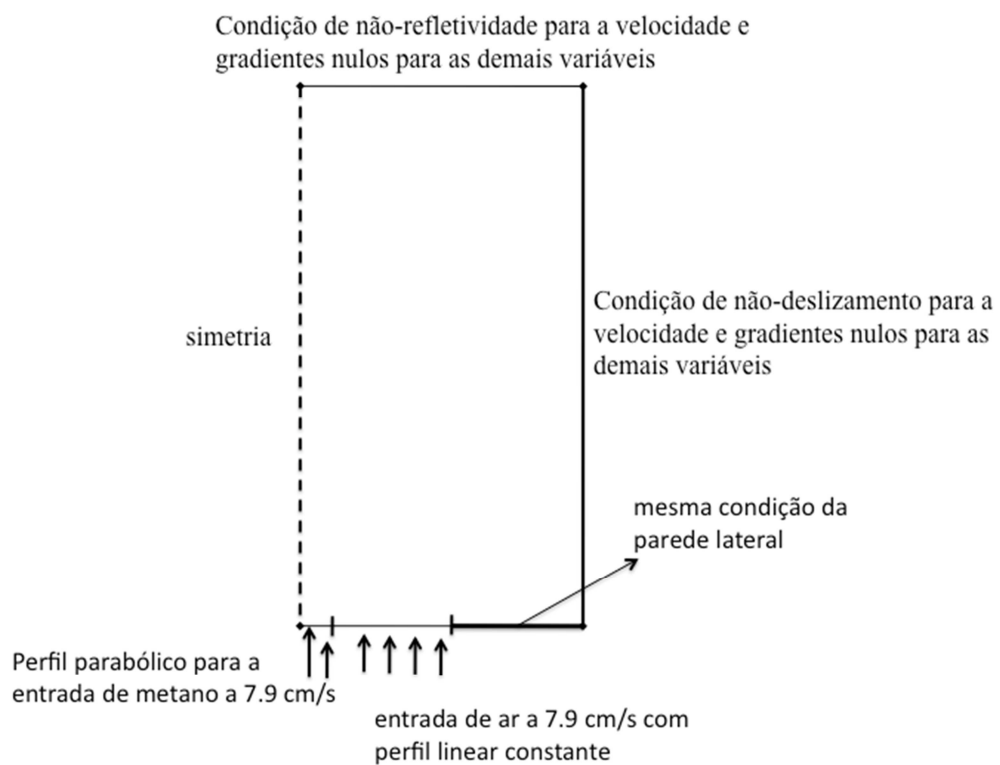


Figura 6.9 – Domínio computacional usado nas simulações (fora de escala).

A geometria foi discretizada utilizando-se uma malha não uniforme em ambas as direções, com um refinamento maior ao longo da entrada de combustível, pois é a região em

que as reações químicas ocorrem. A malha foi formada por 281 pontos na direção axial e 121 pontos na direção radial, conforme detalhado na Figura 6.10.

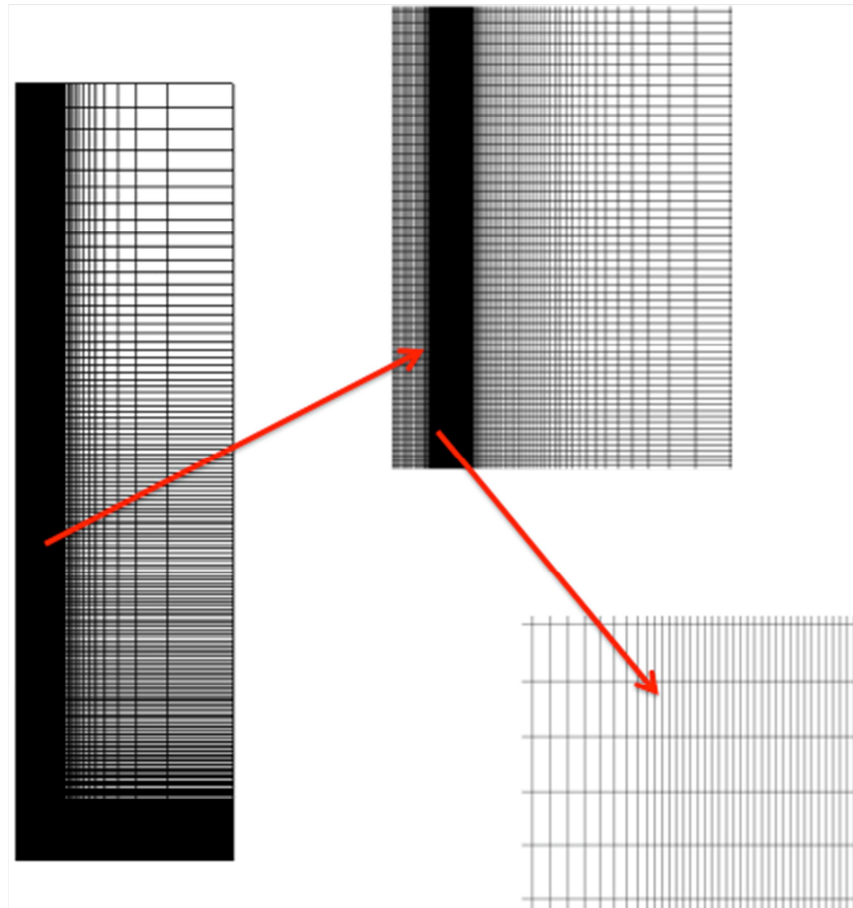


Figura 6.10 – Malha utilizada nas simulações.

Para as simulações, foi utilizado o cluster “Lonestar” do centro de computação avançado da universidade do Texas (TACC – Texas Advanced Computing Center). O cluster possui 1888 nós, fabricados pela Dell, e utiliza o Linux como sistema operacional. Cada nó possui 24 GB de memória e 12 processadores com 3,33 GHz de frequência da um. Para reduzir o tempo necessário para a obtenção da solução, o domínio é dividido em partes, e a comunicação entre as interfaces foi feita com a linguagem MPI (message passing interface). A figura a seguir mostra a redução do tempo computacional, de acordo com o número de processadores utilizados nas simulações.

Assim, analisando a curva mostrada na Figura 6.11, as simulações foram realizadas com a utilização de 8 processadores, o que reduziu o tempo computacional total em aproximadamente sete vezes.

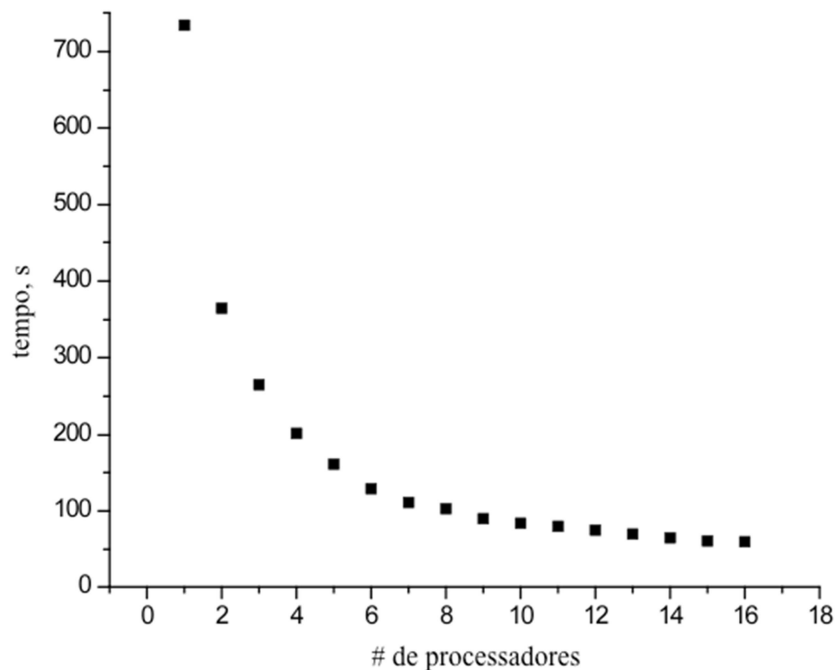


Figura 6.11 – Variação do tempo computacional requerido para 500 passos de tempo, de acordo com o número de processadores usados.

A equação do transporte radiante é resolvida com os quatro diferentes modelos descritos anteriormente, onde são considerados campos não-uniformes de temperatura, concentrações de gases e fuligem, resultantes da simulação da queima de metano em ar previamente obtidos por Barve et al., 2007. Os campos usados nas simulações são descritos nas figuras a seguir.

Como pode ser visto na Figura 6.12 (a), a temperatura está em torno de 1800 K na região da chama, e cai rapidamente para 400 K ao redor da mesma. Gradientes elevados também aparecem nas concentrações de H_2O , CO_2 , mostradas na Figura 6.12 (b) e CO (Figura 6.13). Como o gás que foi queimado é o metano, uma pequena formação de fuligem, com baixas concentrações, é observada, conforme pode ser visto na Figura 6.13.

Resultados linha-por-linha para o cálculo do divergente do fluxo radiante ainda inviáveis em um problema com essa complexidade. Assim, considerando as comparações feitas nos casos unidimensionais descritos anteriormente, assume-se que o modelo CW fornece os resultados mais precisos para o divergente do fluxo radiante entre os modelos aplicados nesse trabalho, porém não há como verificar se essa precisão realmente se confirma. Ainda assim as comparações entre os modelos são feitas baseando-se no resultado obtido com o modelo CW.

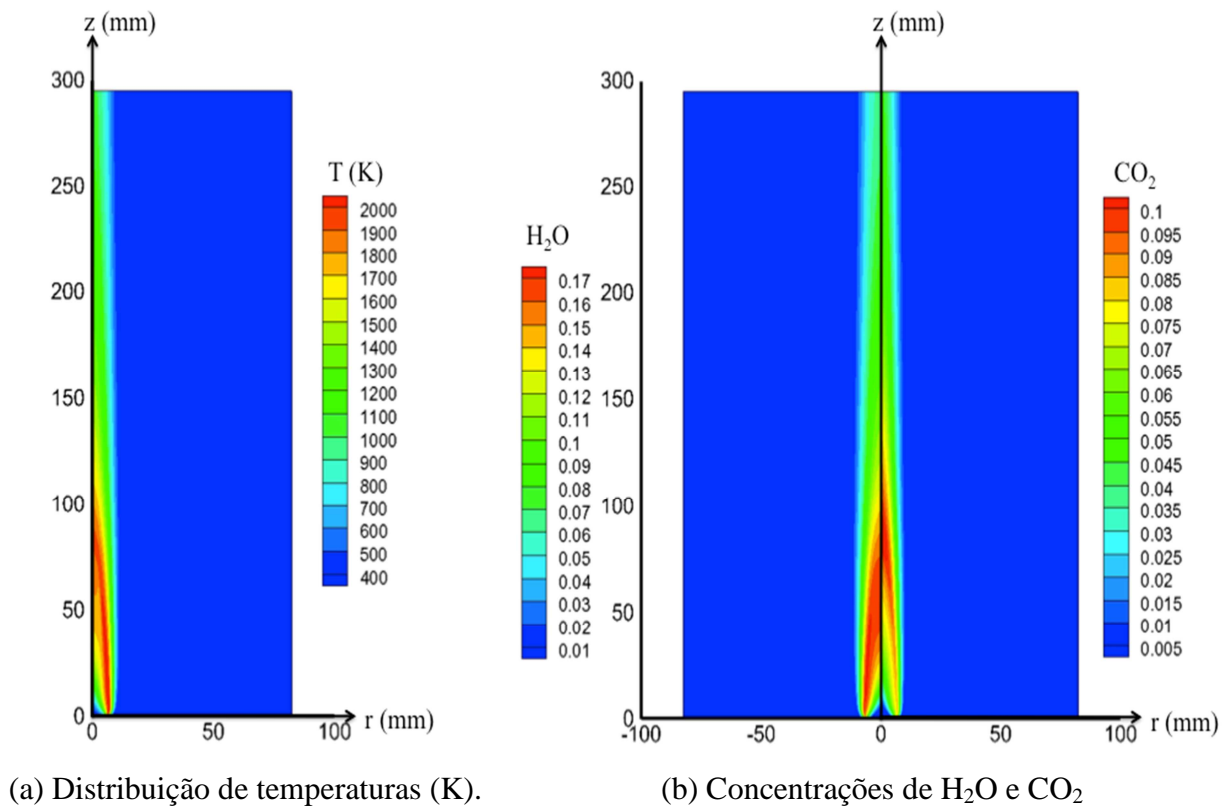


Figura 6.12 – Campo de temperatura e concentrações de H₂O e CO₂ usadas nas simulações

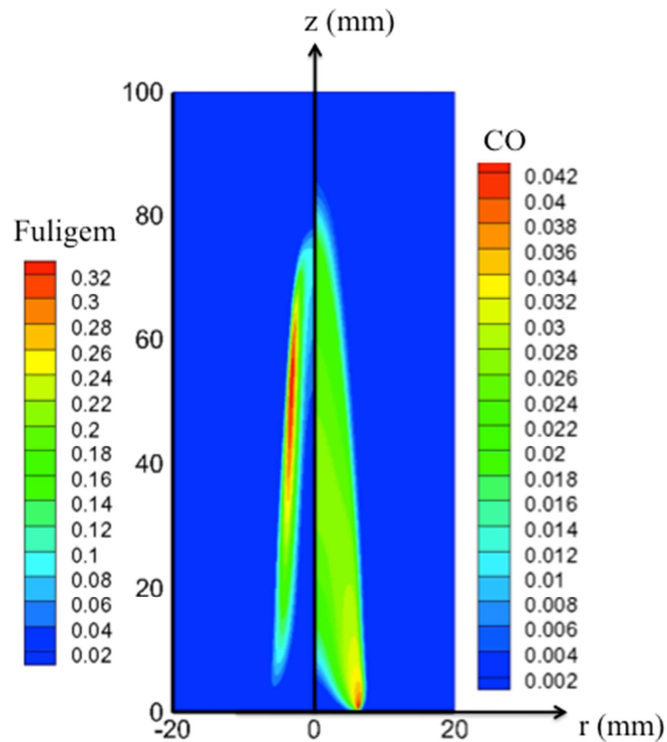


Figura 6.13 – Concentração de CO (ampliado na região da chama) e de Fuligem (ppm)

A Figura 6.14 (b) mostra o divergente do fluxo radiante calculado com o modelo CW. Como foi mostrado nas figuras 6.12 e 6.13, os gases H_2O , CO_2 , CO e a fuligem estão confinados em uma pequena faixa do domínio. Isso explica o porquê da variação do divergente do fluxo radiante apenas ao longo da região da chama, sendo que no restante do domínio o valor do divergente do fluxo é nulo, pois naquelas regiões, mostradas na Figura 6.14 (a), o meio é composto basicamente por O_2 e N_2 , que são inertes à radiação térmica nessas temperaturas.

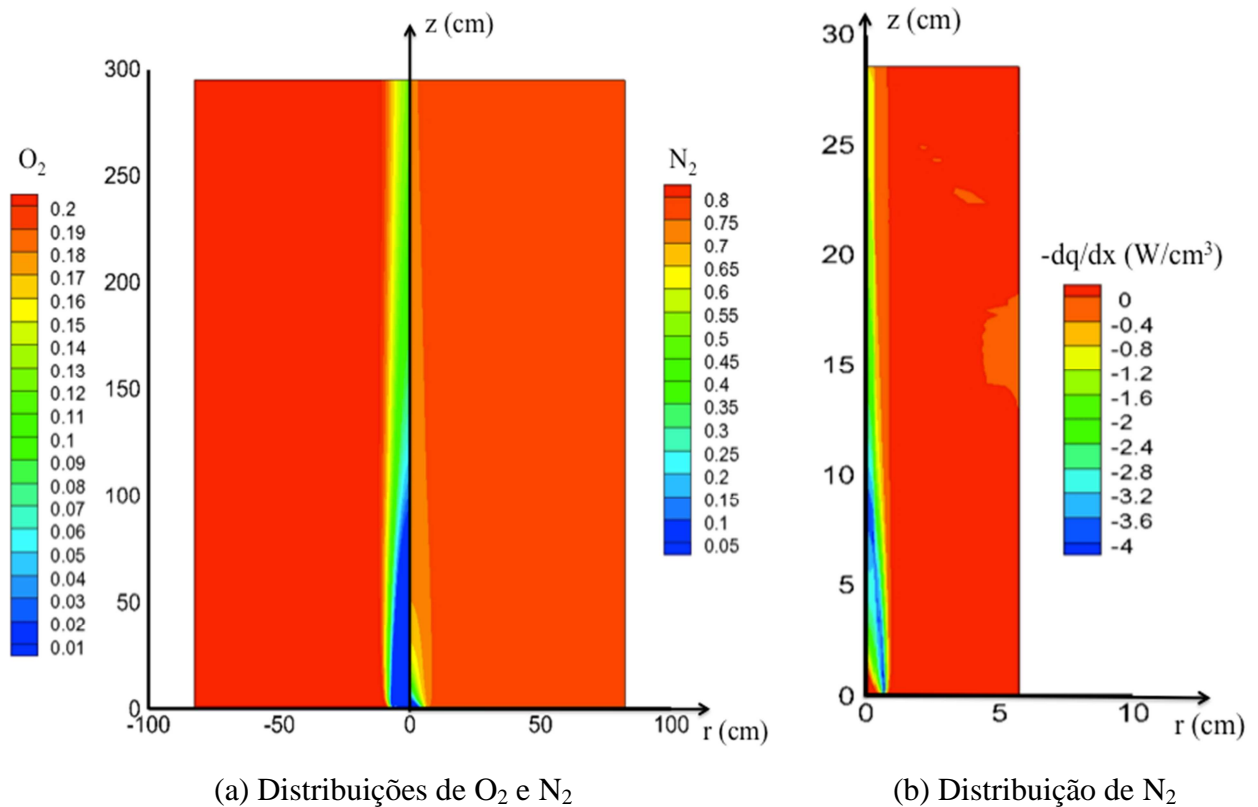
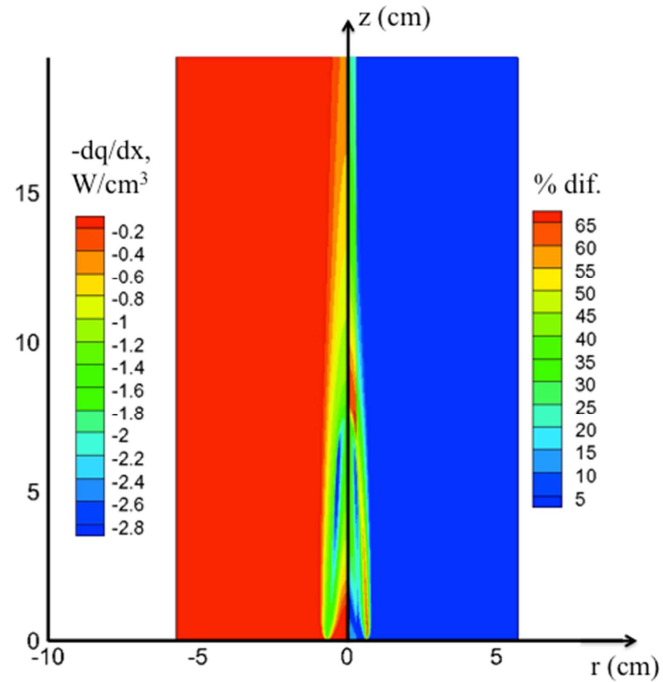
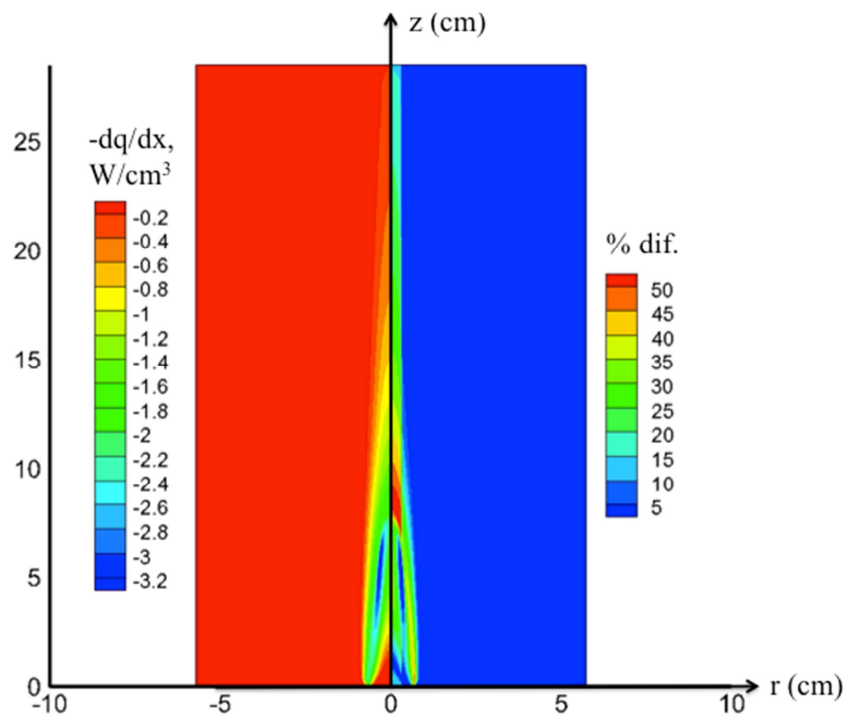


Figura 6.14 – Divergente do fluxo radiante calculado com o modelo CW e as distribuições de O_2 e N_2 ao longo da geometria.

As Figuras 6.15(a) e 6.15(b) mostram o divergente do fluxo radiante calculado com o modelo WSGG. Na Figura 6.15(a), foram usadas as correlações propostas por Smith et al. (1982) e na Figura 6.15(b), as correlações propostas nesse trabalho.



(a) Modelo WSGG usado com as correlações propostas por Smith et al., 1982, e a diferença em relação ao modelo CW.



(b) Modelo WSGG usado com as novas correlações propostas nesse trabalho e a diferença em relação ao modelo CW.

Figura 6.15 – Divergente do fluxo de calor radiante calculado com o modelo WSGG e diferença em relação ao modelo CW.

Apesar de haver uma melhora nos resultados com as novas correlações, em comparação com o modelo CW, ainda assim houve uma baixa variação local entre as correlações antigas e as novas propostas neste trabalho. Essa baixa variação ocorreu por que para baixas espessuras ópticas, as emissividades calculadas por Smith et al., 1982, diferem muito pouco das novas emissividades obtidas neste trabalho, as diferenças maiores ocorrem em espessuras ópticas mais elevadas, como pode ser visto na Figura 6.16.

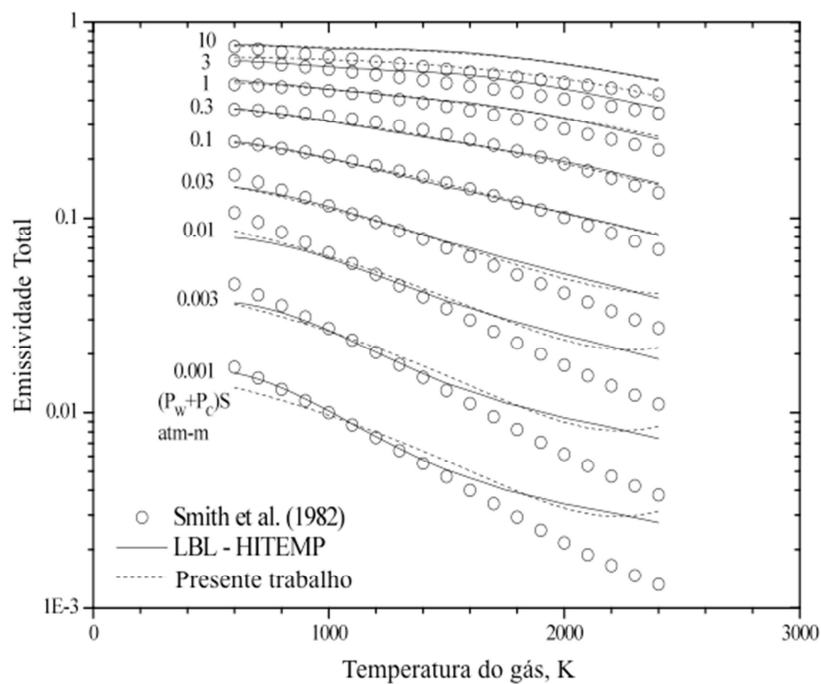
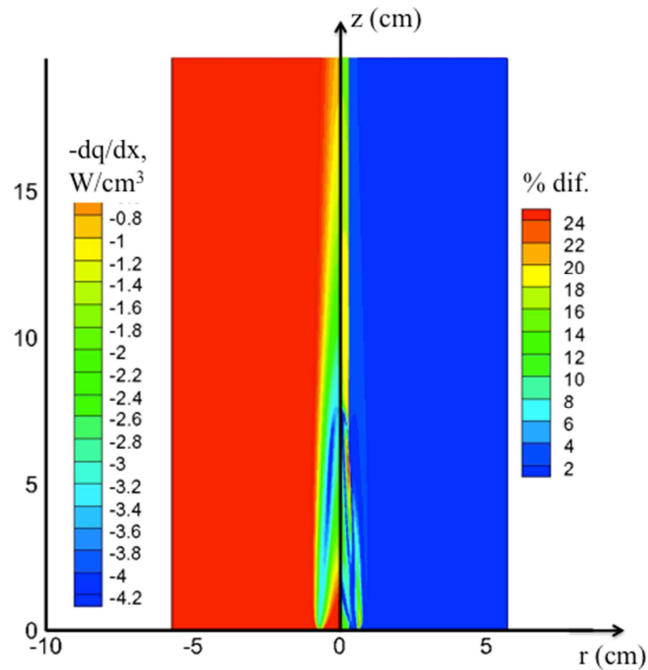


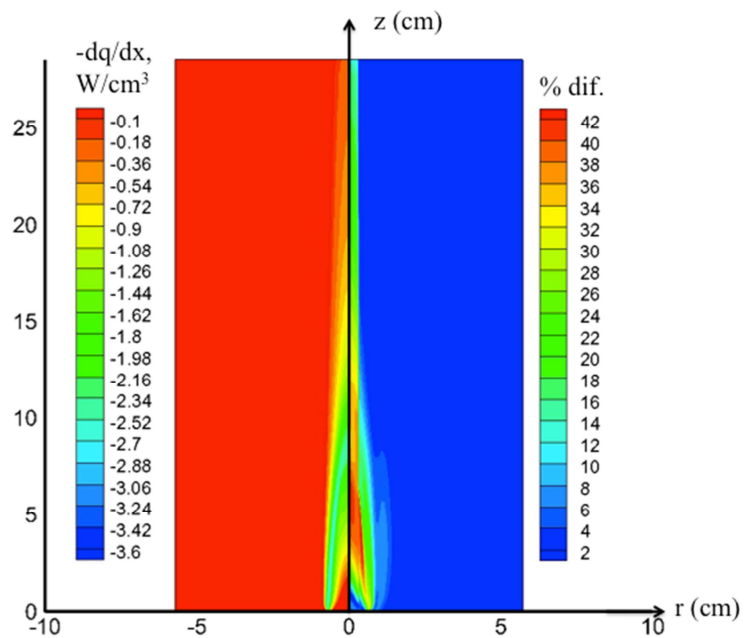
Figura 6.16 – Emissividade total e as correlações para uma mistura composta por 20% H₂O e 10% CO₂.

As figuras 6.17 (a) e (b) mostram o divergente do fluxo calculado com o modelo do gás cinza e com o modelo SLW. As simulações com o modelo do gás cinza foram muito próximas do modelo CW, especialmente na região da chama, onde o erro máximo foi de aproximadamente 25%. Já nas simulações com o modelo SLW, foi observada uma dificuldade maior nas aproximações envolvendo fuligem, sendo que houve uma diferença maior entre os resultados exatamente na região da chama em que a fuligem está presente. Em todas as simulações bidimensionais realizadas, contrariamente ao que se esperava, houve uma maior aproximação dos resultados obtidos entre os modelos CW e gás cinza do que entre os modelos CW e os demais modelos espectrais estudados. Isso demonstra que em meios opticamente finos, onde o gás absorve muito pouco a radiação, o modelo do gás cinza pode ser empregado com segurança, pois produz resultados mais rápidos que os demais modelos e

confiáveis. Mas o mesmo modelo deve ser empregado cautelosamente em meios com uma espessura óptica mais elevada, pois superestima a radiação térmica.



(a) Modelo do gás cinza e diferença em relação ao modelo CW.



(b) Modelo SLW e diferença em relação ao modelo CW.

Figura 6.17 – Divergente do fluxo de calor radiante calculado com o modelo do gás cinza e com o modelo SLW, e as respectivas diferenças em relação ao modelo CW.

7 INFLUÊNCIA DOS DIFERENTES MODELOS DE RADIAÇÃO TÉRMICA NO PROCESSO DE COMBUSTÃO

O Capítulo 7 detalha os efeitos causados pelos diferentes modelos de radiação térmica em um processo de combustão de metano com ar, considerando uma geometria cilíndrica, conforme mostrada no Capítulo 6. Primeiramente é feita uma validação das simulações, baseando-se nos experimentos feitos por Kaplan et al., 1996, e em seguida é mostrado os efeitos causados pela modelagem da radiação térmica no campo de temperatura e concentrações das espécies químicas.

7.1 Validação das Simulações

A Figura 7.1 apresenta o campo de temperaturas que reproduz o experimento feito por Kaplan et al., 1996. No experimento, os autores capturaram o perfil de temperatura em 4 diferentes regiões da chama, como o destacado na figura abaixo.

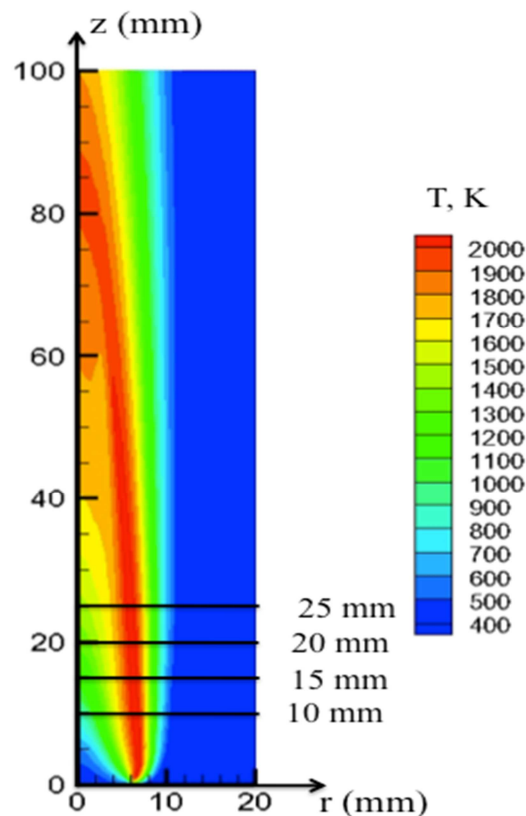
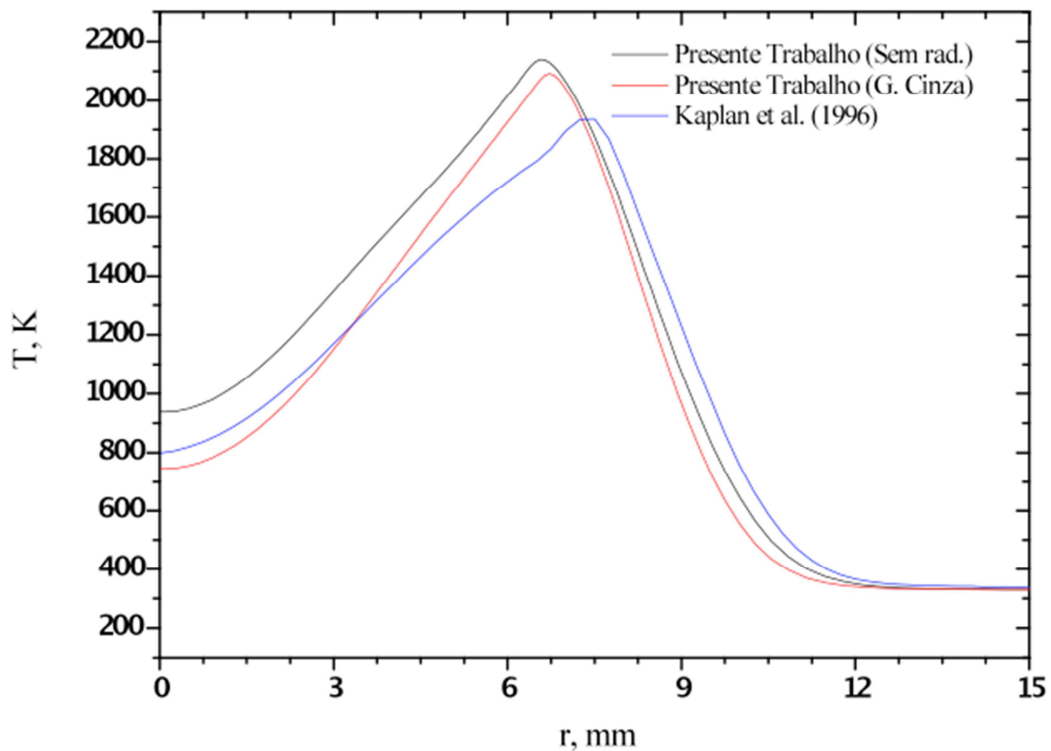


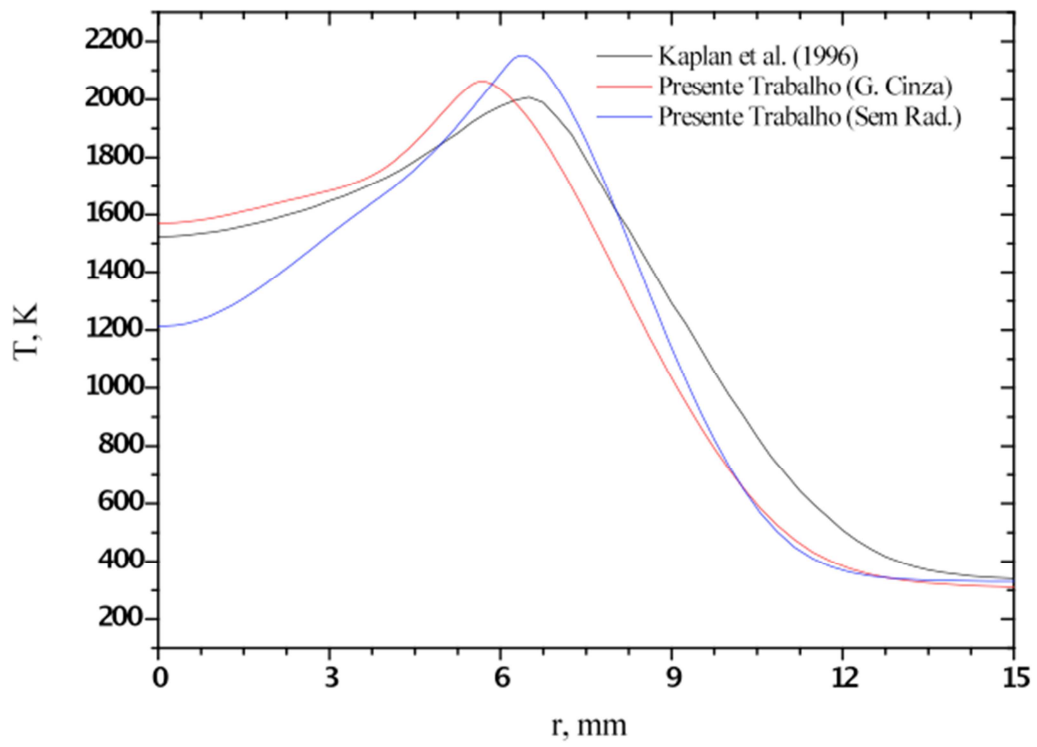
Figura 7.1 – Linhas de temperatura usadas nas comparações com os dados experimentais obtidos por Kaplan et al., 1996.

A Figura 7.2 apresenta as comparações feitas entre os perfis obtidos pelas simulações neste trabalho, considerando um caso em que a radiação térmica foi negligenciada e outro em que foi usado o modelo do gás cinza, e os obtidos experimentalmente por Kaplan et al., 1996, nas quatro diferentes regiões da chama destacadas na Figura 7.1.

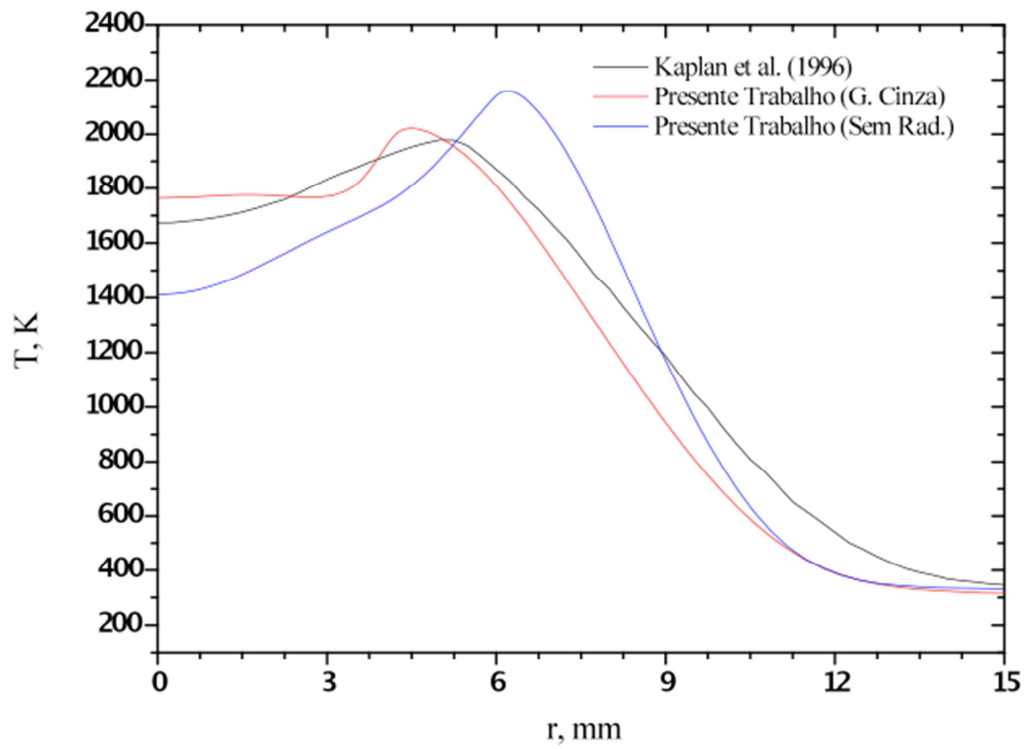
Analisando os perfis, percebe-se que os casos em que o modelo de radiação térmica foi utilizado seguem a mesma tendência dos dados experimentais, mas verifica-se uma diferença máxima de 12,2% na região de maior temperatura na figura 7.2 (a) e de 11,8% na região próxima ao raio de 10 mm nas figuras (b) e (c). Na figura 7.2 (d), a diferença máxima foi de aproximadamente 8%. Quando os dados experimentais são comparados com as simulações em que a radiação térmica foi negligenciada, ocorreram diferenças maiores nos perfis de temperatura, principalmente nas alturas 20 mm e 25 mm, mostradas na figura 7.2 (c) e (d).



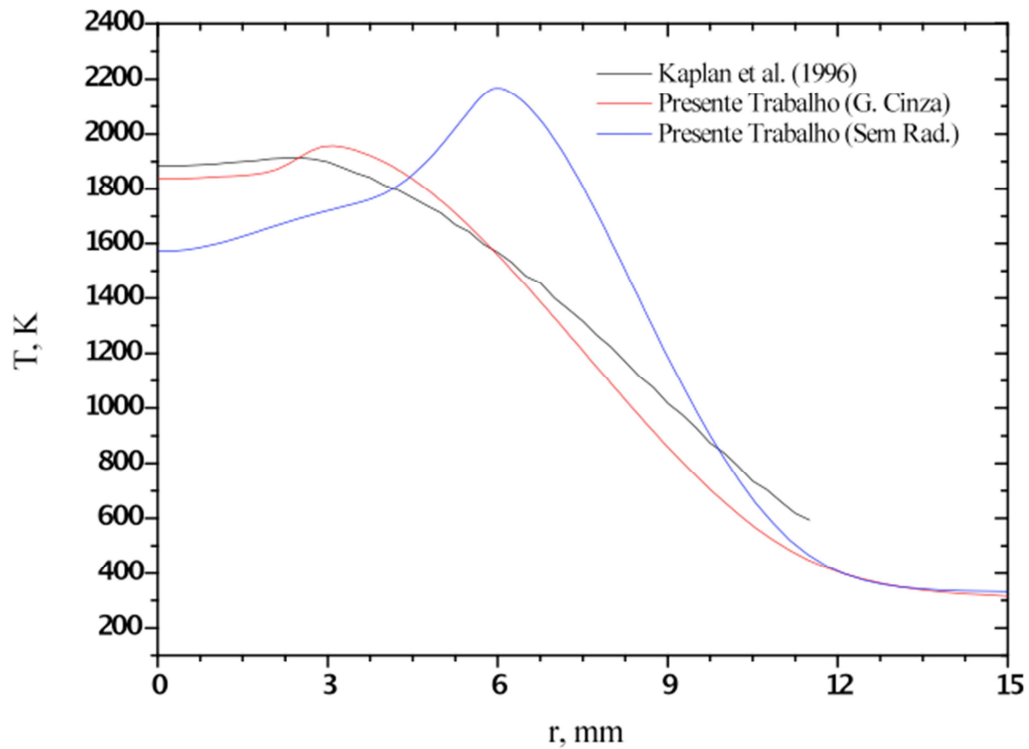
(a) Perfil de temperatura, 10 mm.



(c) Perfil de temperatura, 15 mm



(c) Perfil de temperatura, 20 mm



(d) Perfil de temperatura, 25 mm

Figura 7.2 – Comparação dos perfis de temperatura com os dados experimentais obtidos por Kaplan et al., 1996.

7.2 Comparação entre os Diferentes Modelos de Radiação Térmica

Inicialmente, foi feita uma simulação do processo de combustão sem que os efeitos da radiação térmica fossem considerados. O critério de convergência mínimo adotado, definido pela Equação 7.1, foi de 10^{-4} para todas as variáveis do problema analisado, sendo que a última variável a atingir esse critério foi a entalpia, pois a convergência dessa variável é muito lenta em relação as demais, que atingiram um critério de convergência de 10^{-7} em aproximadamente 6 horas de simulação. As figuras a seguir mostram as distribuições de temperatura e algumas das principais espécies envolvidas no processo. O tempo total de simulação para esse caso foi de 17h45min.

$$\frac{\alpha^n - \alpha^o}{\alpha^o} \leq 10^{-4} \quad (7.1)$$

A Figura 7.3 mostra os vetores de velocidade na região da chama. Como pode ser visto, o campo de temperaturas comanda o aumento da velocidade, devido as mudanças que o mesmo causa na massa específica da mistura dos gases que estão presentes na região, aumentando o empuxo.

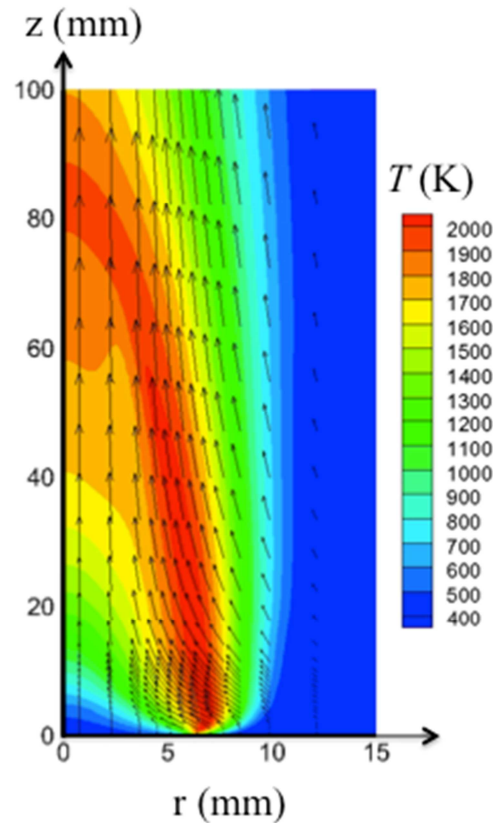


Figura 7.3 – Vetores de velocidade juntamente com o campo de temperatura

A Figura 7.4 mostra a distribuição de temperatura e a concentração de H_2O ao longo da geometria. Sem considerar os efeitos da radiação térmica, a temperatura na chama ficou em torno de 2000 K, chegando a um valor máximo de 2150 K. Na região logo acima da chama, onde estão presentes os gases resultantes da combustão, a temperatura é de aproximadamente 1300 K e cai rapidamente para menos de 500 K nas regiões onde estão presentes apenas os gases N_2 e O_2 , pois estes gases não absorvem nem emitem radiação a estas temperaturas. A concentração de H_2O resultante da queima do metano fica em torno de 17% na chama, região onde as principais reações químicas ocorrem devido às altas temperaturas, e cai para aproximadamente 10% na região acima da chama, onde não existem mais reações.

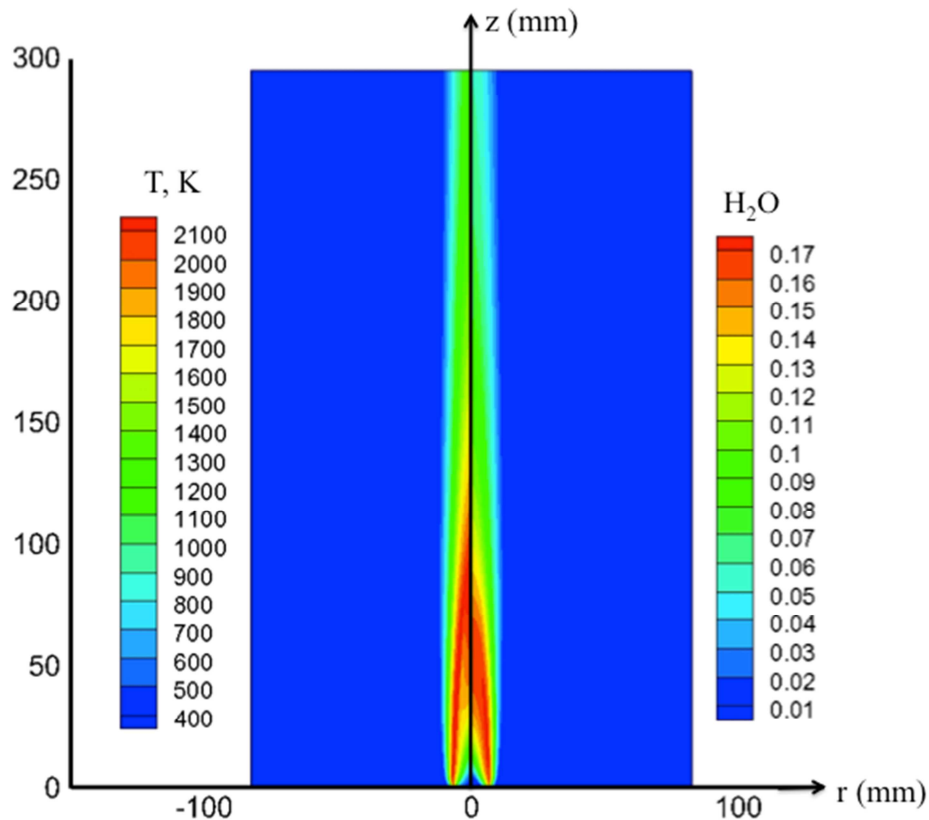


Figura 7.4 – Distribuição de temperatura e concentração de H₂O.

A Figura 7.5 apresenta as concentrações de CO₂ e CO ao longo da geometria. A maior concentração de CO₂ é de aproximadamente 10% e está contida ao final da região delimitada pela chama. Esta concentração fica em torno de 5% na medida em que se afasta da chama ao longo do escoamento.

O monóxido de carbono (CO), que é formado principalmente pelas reações envolvendo as partículas de fuligem e a hidroxila, fica estritamente confinado no interior da chama, onde, devido as altas temperaturas a que está submetido, possui energia suficiente para reagir e formar CO₂. Sua concentração média no interior da chama é de 3%. Do ponto de vista da radiação térmica, dentre os gases participantes, o CO é o que possui a maior capacidade de absorver e emitir radiação, devido a seu alto coeficiente de absorção. Mas por ser extremamente nocivo a saúde e ao meio ambiente, é importante controlar o processo de combustão para que esse gás não seja liberado para a atmosfera.

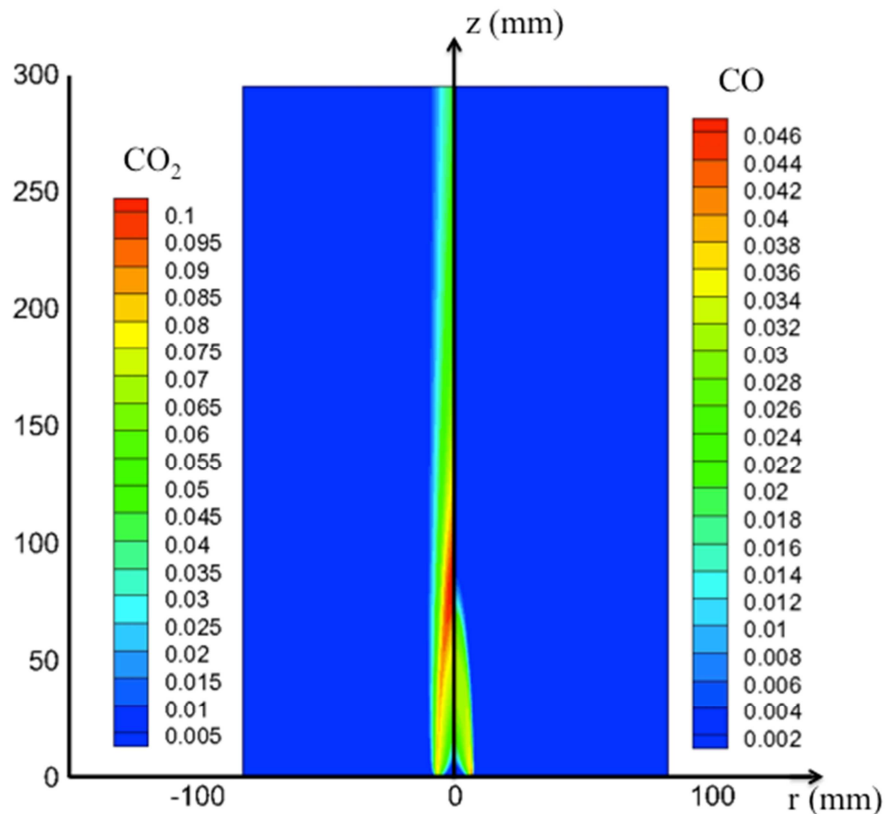


Figura 7.5: Concentrações de CO_2 e CO .

Pesquisas recentes utilizam um sistema, denominado de oxi-combustão, o qual retém o dióxido de carbono no sistema. Do ponto de vista da radiação térmica, esse gás é usado no sistema tanto para homogeneizar quanto para aumentar a temperatura média no interior da câmara, fazendo com que uma quantidade menor de combustível seja usada para que se mantenha determinada temperatura. E do ponto de vista ambiental, esse tipo de sistema é bem vindo, pois além de reter o CO_2 gerado na combustão, o qual ainda pode ser retido, faz com que menos gases sejam gerados, devido à economia na queima de combustíveis.

A Figura 7.6, mostra as distribuições de fuligem e de hidroxila. Como o metano possui apenas um carbono em sua estrutura molecular, a formação de fuligem é muito baixa na queima, chegando a pouco mais de 0,5 ppm neste caso analisado. A hidroxila, que está contida em uma pequena faixa, serve como um marcador da região em que a chama está contida. Neste caso, praticamente toda a fuligem formada reage com a hidroxila, formando o monóxido de carbono. Isto explica o motivo de praticamente não se ver fumaça preta em casos práticos da queima de metano.

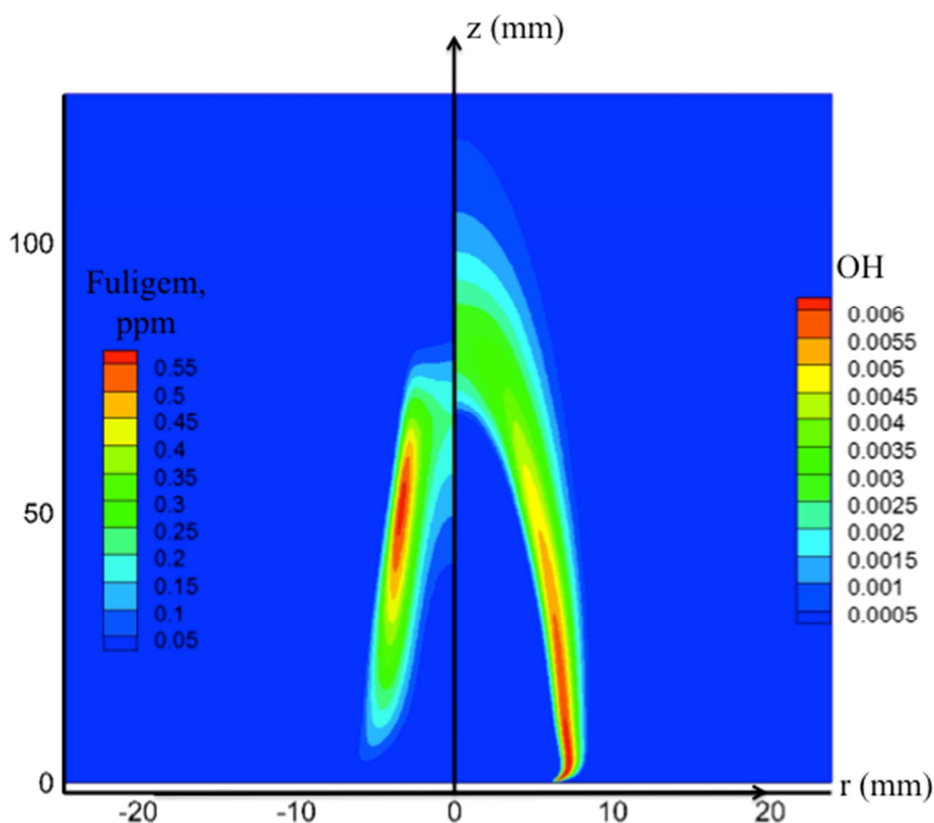


Figura 7.6 – Distribuição de fuligem e concentração de OH.

O objetivo principal desse trabalho é analisar a influência da radiação térmica em processos de combustão, uma vez que esses efeitos são geralmente desconsiderados. Assim, a mesma simulação mostrada anteriormente foi refeita, mas dessa vez a radiação térmica foi considerada durante todo o processo, com o uso do modelo do gás cinza. Os resultados obtidos com o uso desse modelo simples foram comparados com os obtidos sem que a radiação térmica fosse considerada, mostrados anteriormente. Para o campo de temperaturas, foi feita a diferença entre as obtidas com o modelo de radiação e as obtidas sem um modelo de radiação, em cada ponto da malha. Nas demais variáveis comparadas (H_2O , CO_2 , CO , OH , fuligem), essa diferença foi normalizada pelo valor máximo obtido na simulação em que o modelo de radiação foi considerado.

Como pode ser visto na Figura 7.7, quando um modelo de radiação foi introduzido nas simulações, houve uma redução de mais de 200 graus na temperatura da chama, e ainda houve um decréscimo de aproximadamente 100 graus ao longo do domínio, na região superior à chama ao longo do escoamento. Na concentração de H_2O , desconsiderando-se a grande variação logo após a entrada de combustível, devido a um pequeno estreitamento da chama,

houve um aumento de aproximadamente 5% na concentração. Uma baixa variação na concentração também é observada para o CO₂, na Figura 7.8.

A baixa influência da radiação térmica na produção de H₂O e CO₂ era esperada, pois tratam-se de variáveis primárias no processo da queima de combustível, já que são variáveis menos sensíveis a variação de temperatura e, inclusive, o mais simples dos modelos de combustão é capaz de prever a quantidade desses gases que será formado no processo. O mesmo não pode ser afirmado para a produção de CO, que é um gás que precisa de uma alta energia de ativação para se formar, assim pequenas variações na temperatura podem influenciar no processo. Comparando as figuras 7.7 e 7.8, percebe-se que as regiões em que houve uma maior variação local na temperatura foram as mesmas que mais influenciaram na variação da distribuição de CO.

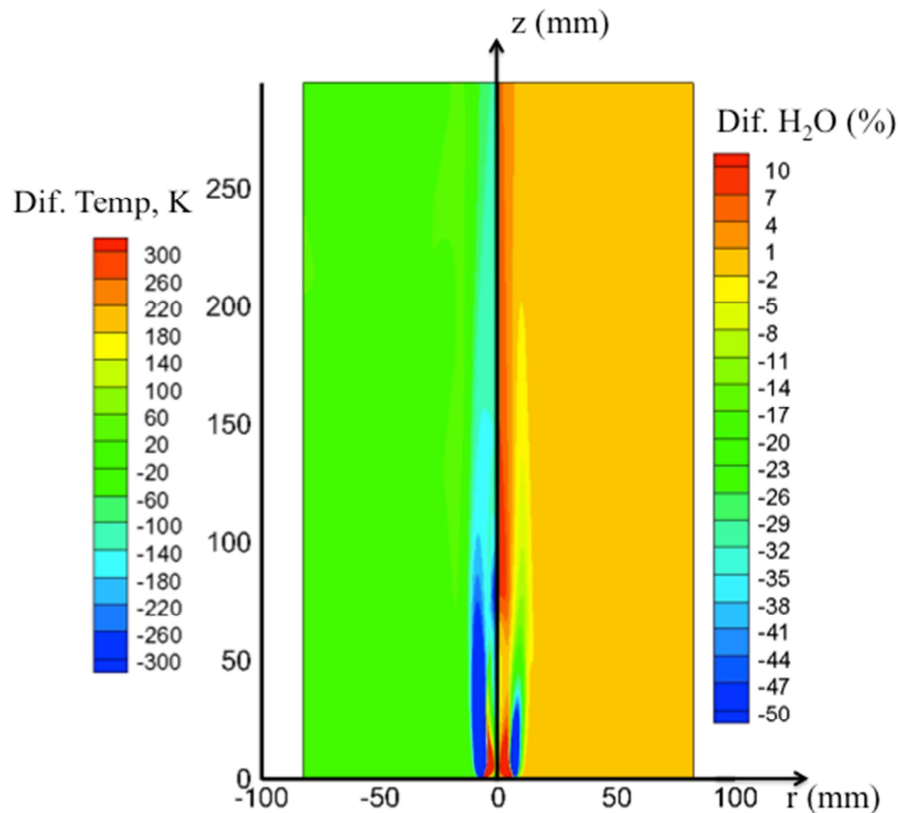


Figura 7.7 – Diferença de temperatura (dif. Temp = $\text{temp}_{\text{gás cinza}} - \text{temp}_{\text{sem rad}}$) e diferença relativa de H₂O (dif. H₂O = $(\text{H}_2\text{O}_{\text{gás cinza}} - \text{H}_2\text{O}_{\text{SLW}}) / \text{H}_2\text{O}_{\text{gás cinza, máx}}$)

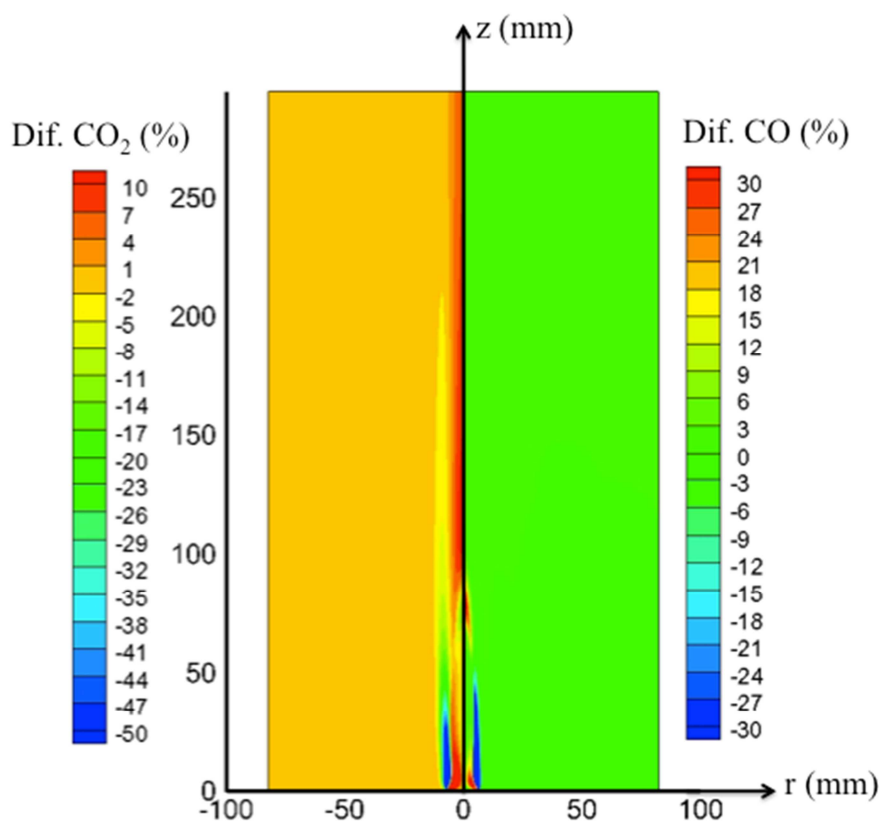


Figura 7.8 – Diferença relativa de CO₂ e diferença relativa de CO (fórmulas análogas a do H₂O)

O mesmo efeito pode ser observado na Figura 7.9, onde a produção de fuligem sofreu uma variação total de 170%, sendo que houve uma redução em pouco mais de 100% na concentração da fuligem no interior da chama e um aumento de aproximadamente 50% ao final da chama, região onde os níveis de hidroxila diminuíram com a introdução do modelo de radiação. Baseando-se nas duas simulações, percebe-se que a introdução de um modelo de radiação interferiu diretamente na produção de fuligem, diminuindo drasticamente em uma região da chama e aumentando em outra. Mas devido à complexidade do problema analisado, uma vez que todas as variáveis do processo estão acopladas, é difícil descrever o efeito global causado pelo aumento ou diminuição de uma única variável na produção ou destruição de outra. Por exemplo, a quantidade de fuligem existente no processo depende de quantos carbonos ficam livres durante a queima, e de quantos não reagem com as hidroxilas e com as partículas de oxigênio. Mas para que essas reações ocorram, é fundamental que se tenha energia suficiente, a qual depende diretamente da temperatura. Por outro lado, a fuligem possui uma capacidade de emissão de radiação muito grande, assim quanto mais fuligem existe no processo, maior será o divergente do fluxo radiante nas regiões de maior

temperatura, o que faz com que a temperatura máxima diminua, e que os gradientes de temperatura também diminuam. Essa diminuição no gradiente de temperatura faz com que a produção de fuligem diminua, fazendo com que o divergente do fluxo radiante também diminua, assim os gradientes de temperatura aumentam e o processo continua até que seja atingido um equilíbrio termodinâmico. Dessa forma, não parece fazer sentido analisar a influência isolada de uma variável nesse processo de combustão. O tempo total de simulação com o modelo de radiação adicionado ao processo foi de 29h20min, um aumento de aproximadamente 65% ao tempo computacional gasto no processo em que a radiação térmica não foi considerada.

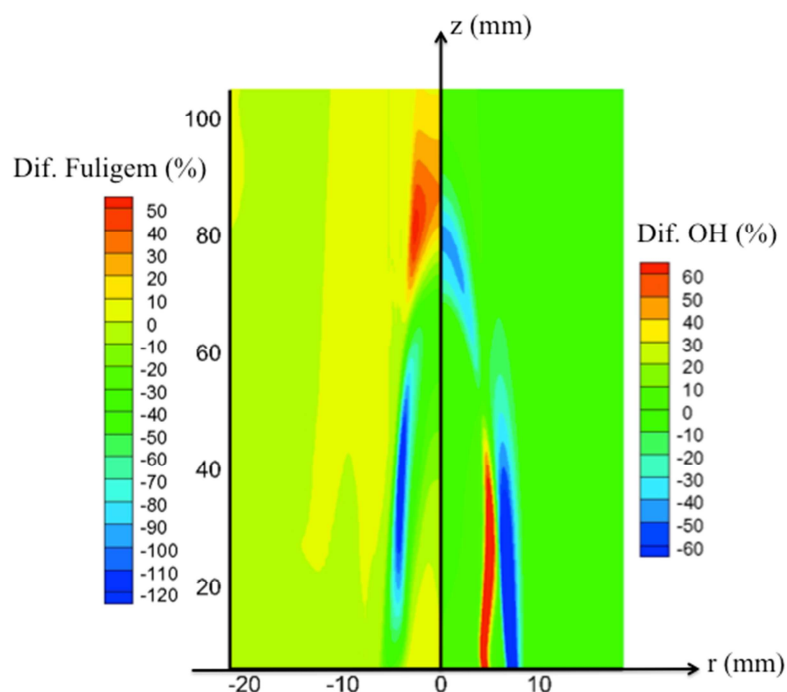


Figura 7.9 –Diferença na distribuição de fuligem e na concentração de OH (fórmulas análogas a do H_2O)

A mesma simulação foi novamente refeita, mas dessa vez foi usado o modelo espectral SLW para a radiação térmica. O tempo total de simulação para este caso foi de aproximadamente 48h. Um aumento de 60% em relação ao tempo computacional usado pelo modelo do gás cinza. Com o uso desse modelo, pouca variação foi observada em relação aos resultados obtidos com o modelo do gás cinza. Como pode ser visto na Figura 7.10, houve uma variação máxima de apenas 100 graus no campo de temperaturas, o que representa aproximadamente 5% de variação. Quanto à variação na concentração de H_2O , o campo permaneceu praticamente estável, com aproximadamente 3% de variação ao longo do

domínio. O mesmo efeito aconteceu nas concentrações de dióxido e monóxido de carbono, apresentados na Figura 7.11, onde a variação total também foi de pouco mais que 3%, sendo que em uma pequena parte do domínio, a concentração de CO atingiu uma variação de 5%.

Os efeitos que a troca da modelagem de radiação causou na produção de fuligem e de hidroxila foram um pouco maiores, mas ainda assim discretos. Essa baixa influência deve-se ao fato de termos um meio opticamente fino, situação a qual o modelo do gás cinza pode ser perfeitamente aplicado. Os resultados obtidos com o modelo WSGG não serão apresentados, pois pouco diferem dos obtidos pelo modelo do gás cinza e pelo modelo SLW. O tempo total de simulação gasto com o modelo WSGG foi de 34h20min. As simulações com o modelo CW não convergiram. Tentativas de sub-relaxação foram feitas, mas sem êxito. Testes em situações unidimensionais mostraram que em alguns casos com altos gradientes de temperaturas e concentrações, o valor obtido para o divergente do fluxo radiante com o modelo CW apresentaram resultados totalmente equivocados, mas o problema era contornável com a mudança do estado de referência termodinâmico. A mudança do ponto de referência usado no modelo também foi adotada nas simulações, adotando-se em uma das simulações o valor máximo de temperatura, e em outra, foi adotado o valor máximo de concentração de H_2O , e também o ponto de temperatura média, mas o problema divergiu em todas as tentativas. Em todos os casos analisados com o modelo CW, a solução divergiu durante as primeiras horas de simulação, momentos após a ignição do combustível. Nessa fase, várias reações estavam ocorrendo e a chama estava começando a se desenvolver em tamanho. Dessa forma, uma alternativa seria adotar outro modelo de radiação térmica durante as primeiras horas de simulação, até que a chama alcançasse um tamanho maior, e houvesse uma menor variação nos campos de temperatura e concentrações entre uma iteração e outra. Então, a partir desse momento, substituir pelo modelo CW e continuar os cálculos. Dessa forma, variações menos abruptas ocorreriam no divergente do fluxo radiante entre uma iteração e outra, o que facilitaria a convergência da solução com o modelo CW.

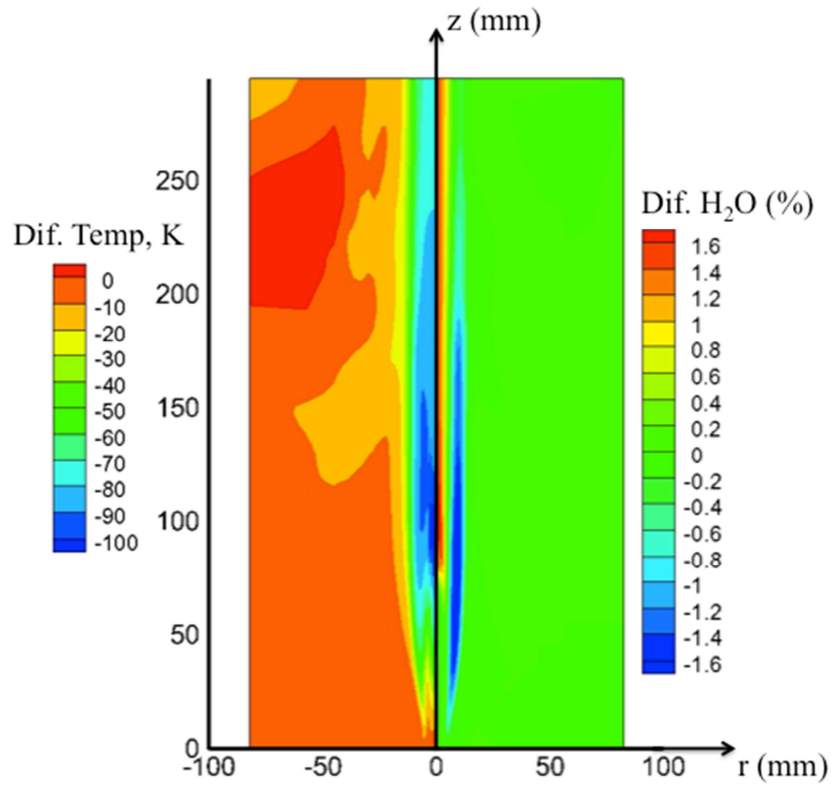


Figura 7.10 – Diferença de temperatura (dif. Temp = $\text{Temp}_{\text{gás cinza}} - \text{Temp}_{\text{SLW}}$) e diferença relativa de H₂O (dif. H₂O = $(\text{H}_2\text{O}_{\text{gás cinza}} - \text{H}_2\text{O}_{\text{SLW}}) / \text{H}_2\text{O}_{\text{gás cinza, máx}}$).

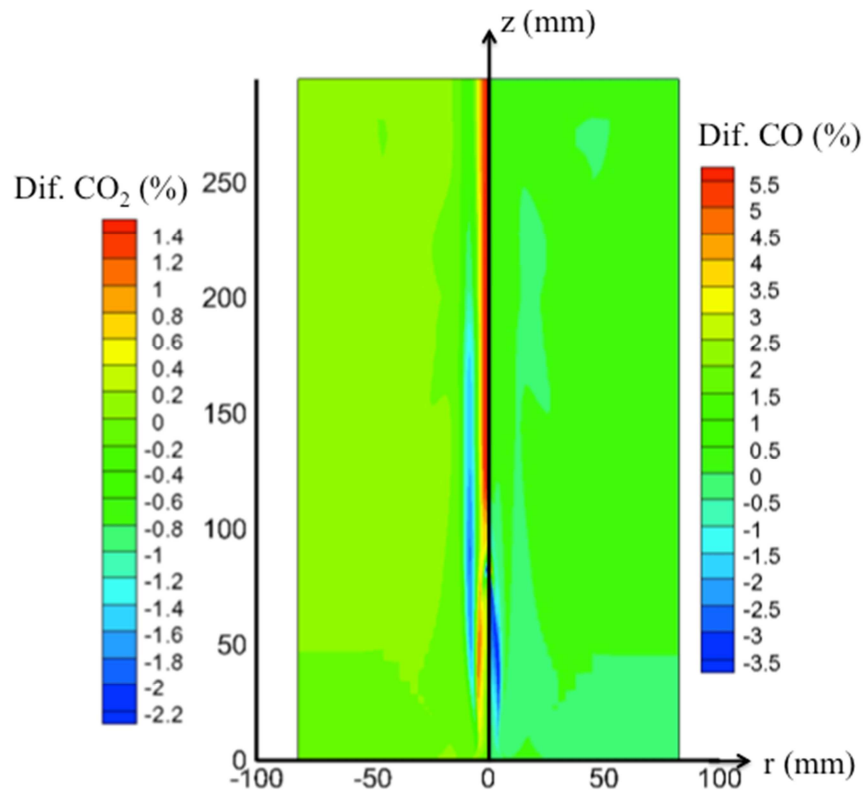


Figura 7.11 – Diferença relativa de CO₂ e diferença relativa de CO.

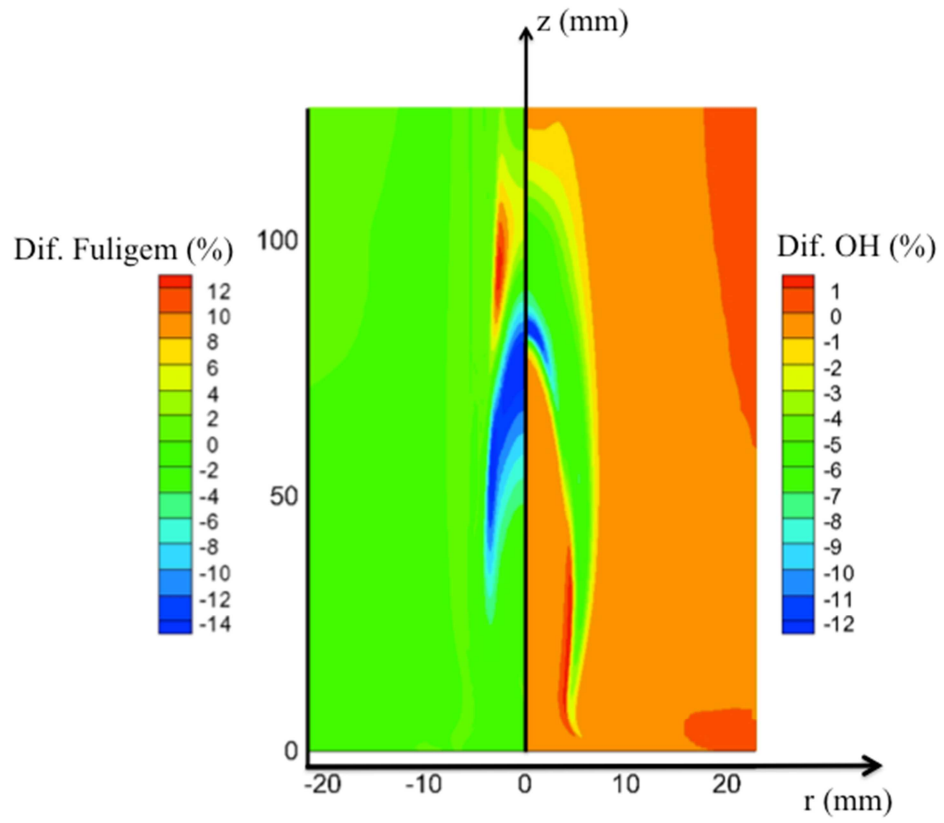


Figura 7.12 – Diferença na distribuição de fuligem e na concentração de OH.

8 CONCLUSÕES E PROPOSTAS PARA TRABALHOS FUTUROS

8.1 Conclusões

O estudo dos efeitos da radiação térmica em problemas de combustão se intensificaram nas últimas duas décadas. Esse aumento no interesse dos pesquisadores está relacionado à importância da radiação térmica nesse tipo de análise, à melhoria nos recursos computacionais disponíveis e à disponibilização de bancos de dados espectrais cada vez mais precisos, que servem para que o coeficiente de absorção dos gases seja conhecido com boa precisão. Dentre os bancos de dados espectrais, destaca-se o HITRAN, que possui informações de mais de trinta moléculas e é atualizado frequentemente, e o HITEMP que possui informações sobre cinco moléculas diferentes que são importantes no processo de combustão, com dados medidos em altas temperaturas. Esse último banco de dados foi atualizado em 2010, após ficar aproximadamente quinze anos sem atualizações. A partir da disponibilização desses banco de dados espectrais, modelos de radiação mais precisos e menos empíricos foram criados por pesquisadores, mas esta área ainda tem muito a avançar, devido à limitação e ao custo computacional dos modelos espectrais disponíveis. Neste trabalho, foram analisados os efeitos da modelagem da radiação térmica no processo de transferência de calor em uma câmara de combustão cilíndrica. Apesar de ter sido considerada uma chama pequena, fora das características utilizadas em processos industriais ou em motores, e ser queimado o metano, que é um gás pouco propenso à formação de fuligem, ainda assim observou-se uma grande influência quando foi utilizado um modelo de radiação térmica nas simulações. Dentre as peculiaridades do problema estudado, está o fato de ser um meio opticamente fino. Em situações que envolvem meios opticamente finos, geralmente até o mais simples dos modelos de radiação é capaz de prever satisfatoriamente o divergente do fluxo de calor por radiação, uma vez que o termo mais importante na modelagem é a intensidade de radiação do corpo negro, que é facilmente conhecido. Isso explica a baixa diferença apresentada nos resultados entre o modelo do gás cinza, o modelo WSGG e o modelo espectral SLW. Por outro lado, a modelagem apresentada nesse trabalho pode ser aplicada a outros casos, com diferentes combustíveis e geometrias. Assim, se for simulado um problema em que o meio não seja opticamente fino, os efeitos de absorção dos gases serão maiores, e as diferenças entre os modelos se acentuariam. Da mesma forma, se fosse queimado um gás diferente, mais propenso à formação de fuligem, as diferenças entre os

modelos de radiação diminuiriam, uma vez que o coeficiente de absorção da fuligem é facilmente modelado, pois sua variação com o número de onda é linear. Outra questão que não está muito consolidada na literatura é sobre a formação de fuligem, dada a complexidade do fenômeno. Neste trabalho foi usado um modelo simples, a duas equações, que considera a formação de fuligem somente a partir do acetileno. Essas reações são muito sensíveis às variações de temperatura e de algumas espécies químicas, tais como a hidroxila, que age como um dissipador dessas partículas sólidas de carbono. Dessa forma, ao se simplesmente adotar outro modelo para a radiação térmica, houve variações significativas na formação dessa quantidade. Portanto, a modelagem da radiação mostrou-se muito importante no processo, e isso deve ser levado em conta ao se fazer esse tipo de análise. Quanto à programação das equações, o fenômeno de combustão analisado nesse trabalho, apesar de não envolver turbulência, necessitou de recursos computacionais elevados e uma programação em paralelo de alto desempenho. Ainda assim, na simulação mais longa, foram exigidos aproximadamente dois dias de simulação com o uso de oito processadores. Em computadores de mesa convencionais, a mesma simulação não levaria menos que duas semanas para atingir a convergência. O modelo de radiação CW, que era inicialmente o principal alvo dessa pesquisa, apresentou problemas inesperados, não descritos na literatura, principalmente em relação ao balanço de energia, problema que motivou o grupo a analisar o caso em separado. Outros problemas menores apresentados pelo modelo CW estão relacionados à sensibilidade dos resultados em relação ao ponto de referência termodinâmico escolhido, podendo em alguns casos inclusive levar à divergência da solução, como aconteceu nas análises estudadas nesse trabalho. O modelo SLW mostrou-se muito estável nas análises, e apresentou boas aproximações nas situações unidimensionais analisadas, e o modelo WSGG apresenta-se como uma ótima alternativa em problemas que envolvam geometrias mais complexas, pois apresenta uma rápida resposta em comparação com o modelo espectral SLW. O caso do modelo do gás cinza deve ser usado com muita cautela, pois dentre as situações analisadas durante a pesquisa, verificou-se que esse modelo é recomendado nas situações em que o meio analisado é opticamente fino ou em situações em que exista muita fuligem. Nos demais casos, esse modelo não apresenta boa resposta para o divergente do fluxo de calor por radiação. De acordo com esse trabalho, a radiação térmica não pode ser negligenciada mesmo em meios que sejam opticamente finos, pois corre-se o risco de comprometer os resultados do campo de temperaturas e das espécies químicas.

8.2 Propostas para Trabalhos Futuros

Destacando-se os avanços recentes na modelagem da transferência de calor por radiação térmica, o presente trabalho mostrou que a radiação tem um papel importante na transferência de calor em sistemas de combustão de pequena escala, e esse papel tende a ser ainda mais importante em sistemas com escalas intermediárias ou grandes. Dessa forma, ignorar a transferência de calor por radiação térmica não pode ser justificada em problemas que envolvam combustão. Assim, seria importante estender esse estudo a sistemas de combustão maiores, considerando os efeitos da turbulência, as interações entre a turbulência e a radiação em escoamentos reativos, e também utilizar modelos mais avançados na modelagem da fuligem, uma vez que a fuligem é responsável por uma grande parcela da transferência de calor por radiação térmica no sistema. Detalhes menores ainda poderiam ser adicionados às simulações, como a introdução de uma “garganta” na geometria, considerando os efeitos da transferência de calor por condução e uma melhoria na paralelização do código computacional, agregando a linguagem “openMP” em algumas partes do programa, pois em alguns casos específicos o desempenho é melhor que a linguagem MPI usada nesse trabalho. Infelizmente ainda não é viável computacionalmente estender as simulações, no nível de complexidade que foi tratado nesse trabalho, dimensões problemas tridimensionais, mas à medida que estações de trabalho mais rápidas forem desenvolvidas, simulações tri-dimensionais seriam um avanço importante para a pesquisa.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Barlow, R.S.; Karpets, A. N.; Frank, J.H. Scalar Profiles and NO Formation in Laminar Opposed-Flow Partially Premixed Methane/Air Flames, **Combustion and Flame**, v. 127, p. 2102-2118, 2001.

Barve, V.V.; Ezekoye, O.A.; Clemens, N.T. Effects of flame lift-off height on soot processes in strongly forced methane-air laminar diffusion flames, Proceedings of HT2007 ASME-JSME Thermal Engineering Summer Heat Transfer Conference July 8-12, Vancouver, British Columbia, CANADA, 2007.

Beltrame, A.; Porshnev, P.; Merchan-Merchan, W.; Saleliev, A.; Fridman, O.; Kennedy, L.A.; Petrova, O.; Zhdanok, S.; Amouri, F.; Charon, O. Soot and No Formation in Methane-Oxygen Enriched Diffusion Flames, **Combustion and Flame**, v. 124, p. 295-310, 2001.

Bird, R.B.; Stewart, W.E.; Lightfoot, E.N. **Transport Phenomena**, 2nd Edition, Wiley, New York, 2002.

Borjini, M. N.; Guedri, K.; Said, R. Modeling of radiative heat transfer in 3D complex boiler with non-gray soot media, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 105, p. 167-179, 2007.

Bradley, D.; Dixon-Lewis, G.; El-Din Habik, S.; Mushi, E.M.J. The Oxidation of Graphite Powder in Flame Reaction Zones, Twentieth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, p. 931-940, 1984.

Carlson, B.G.; Lathrop, K.D. **Transport Theory, The Method of Discrete Ordinates**, in Computing Methods in Reactor Physics, Gordon & Breach, New York, 1968.

Chase, Malcolm W. NIST-JANAF Thermochemical Tables, **Journal of Physical and Chemical Reference Data Monographs**, v. 9, p. 1-1951, 1998.

Chandrasekhar, S. **Radiative Transfer**, Dover, New York, 1960.

D'Anna, D.; Violi, A.; D'Alessio, A. Modeling the Rich Combustion of Aliphatic Hydrocarbons, **Combustion and Flame**, v. 121, p. 418-429, 2000.

D'Anna, D.; Violi, A.; D'Alessio, A.; Sarofim, A.F. A Reaction Pathway for Nanoparticle Formation in Rich Premixed Flames, **Combustion and Flame**, v. 127, p 1995-2003, 2001.

Denison, M.K.; Webb, B.W. A spectral line based weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary RTE solvers, **Journal of Heat Transfer**, v. 115, p. 1004-1012, 1993a.

Denison, M.K.; Webb, B.W. An absorption-line blackbody distribution function for efficient calculation of total gas radiative transfer, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 50, p. 499-510, 1993b.

Denison, M.K.; Webb, B.W. Development and application of an absorption line blackbody distribution function for CO₂, **International Journal of Heat Mass Transfer**, v. 10, p. 1813-1821, 1994.

Denison, M.K.; Webb, B.W. The spectral line-based weighted-sum-of-gray-gases model in nonisothermal nonhomogeneous media, **Journal of Heat Transfer**, v. 117, p. 1813-1821, 1995.

Edwards, D.K. Molecular Gas Band Radiation, **Advances in Heat Transfer**, v. 12, p. 115-193, 1976.

Ezekoye O.A.; Zhang, Z. Soot Oxidation and Agglomeration Modeling in a Microgravity Diffusion Flame, **Combustion and Flame**, v. 110, p. 127-139, 1997.

Fairweather, M.; Jones, W.P.; Lindstedt, R.P. Predictions of Radiative Transfer from a Turbulent Reacting Jet in a Cross-Wind, **Combustion and Flame**, v. 89, p. 45-63, 1992.

Galarça, M.M.; Mossi, A.C.; França, F.H.R. A modification of the Cumulative Wavenumber Method to Compute the Radiative Heat Flux in non-Uniform Media, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 122, p. 384-393, 2011.

Goody, R.M.; Yung, Y.L. **Atmospheric Radiation**. Oxford University Press, 2nd edition, New York, 1989.

Griem, H.R. **Plasma Spectroscopy**. McGraw-Hill, New York, 1964.

Guo, H.; Liu, F.; Smallwood, G.J.; Gülder, Ö.L. The Flame Preheating Effect on Numerical Modelling of Soot Formation in a Two-Dimensional Laminar Ethylene-Air Diffusion Flame, **Combustion Theory and Modelling**, v. 6, p. 173-187, 2002.

Hartmann, J.M.; Leon, R.L.; Taine, J. Line-by-Line and Narrow-Band Statistical Model Calculations for H₂O, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 32, p. 119-127, 1983.

Hottel, H.C.; Cohen, E.S. Radiant Heat Exchange in a Gas-filled Enclosure: Allowance for Nonuniformity of Gas Temperature, **American Institute of Chemical Engineers Journal**, v. 4, p. 3-14, 1958.

Hottel, H.C.; Sarofim, A.F. **Radiative transfer**, McGraw-Hill Book Company, 1967.

Hura, H.S.; Glassman, I. Soot Formation in Diffusion Flames of Fuel/Oxygen Mixtures, Twenty-Second Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, p. 371-778, 1988.

Jendoubi, S. Radiative Transfer Solutions for Cylindrical Coordinates with Emitting, Absorbing and anisotropic Scattering Medium, M.S. Thesis, University of Minnesota, Minneapolis, MN, 1991.

Kamal, A.R.; Salinas, C.T. Application of a Local-Spectrum Correlated Model to Modeling Radiative Transfer in a Mixture of Real Gas Media in Bidimensional Enclosures, **Numerical Heat Transfer**, v. 47, p. 183-207, 2005.

Kaplan, C.R.; Shaddix, C.R.; Smyth, K.C. Computations of Enhanced soot production in time-varying CH₄/Air Diffusion Flames, **Combustion and Flame**, v. 106, p. 392-405, 1996.

Klason, T.; Bai, X.S.; Bahador, M.; Nilsson, T.K.; Sundén, B. Investigation of radiative heat transfer in fixed bed biomass furnaces, **Fuel**, v. 87, p. 2141-2153, 2007.

Kennedy, I.M.; Yam, C.; Rapp, D.C.; Santoro, R.J. Modeling and Measurements of Soot and Species in a Laminar Diffusion Flame, **Combustion and Flame**, v. 107, p. 368-382, 1996.

Leonard, B.P. A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 19, p. 59-98, 1979.

Leung, K.M.; Lindstedt, R.P.; Jones, W.P. A Simplified Reaction Mechanism for Soot Formation in Nonpremixed Flames, **Combustion and Flame**, v. 87, p. 289-305, 1991.

Liu, L.H.; Zhang, L.; Tan, H.P. Radiative transfer equation for graded index medium in cylindrical and spherical coordinate systems, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 97, p. 446-456, 2006.

Ma, L.; Gharebaghi, M.; Porter, R.; Pourkashanian, M.; Jones, J.M.; Williams, A. Modelling methods for co-fired pulverized fuel furnaces, **Fuel**, v. 88, p. 2448-2454, 2009.

Maurente, A.; Vielmo, H.A.; França, F.H.R. A Monte Carlo Implementation to Solve Radiation Heat Transfer in Non-uniform Media with Spectrally Dependent Properties, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 108, p. 295-307, 2007.

Maurente, A.; Vielmo, H.A.; França, F.H.R. 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**, v. 109, p. 1758-1770, 2008.

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

Modest, M.F.; Zhang, H. The Full-spectrum Correlated-k Distribution and its Relationship to the Weighted-sum-of-gray-gases Method. In proceedings of the 2000 IMECE, vol. HTD-366-1, ASME, Orlando, FL, p. 75-84, 2000.

Modest, M.F.; Zhang H. The Full-spectrum Correlated-k Distribution for Thermal Radiation from Molecular Gas-particulates Mixtures, **Journal Heat Transfer**, v. 124, p. 30-38, 2002.

Modest, M. F. Narrow-band and full-spectrum k-distributions for radiative heat transfer-correlated-k vs. scaling approximation, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 76, No. 1, p. 69-83, 2003.

Moss, J.B.; Stewart, C.D.; Young, K.J. Modeling Soot Formation and Burnout in a High Temperature Laminar Diffusion Flame Burning under Oxygen-Enriched Conditions, **Combustion and Flame**, v. 101, p. 491-500, 1995.

Mossi, A.; Barve, V.; Galarça, M.; Vielmo, H.; França, F.; Ezekoye, O. Spectral gas absorption coefficient model effects on radiative source term in a 2D axisymmetric diffusion flame, International Heat Transfer Conference, Washington D.C., 2010.

Patankar, S.V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. McGraw-Hill, New York, 1980.

Peters, N. **Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in combustion systems, Lecture Notes in Physics**, Springer-Verlag, Berlin, 1993.

Peyret, R.; Taylor, T.D. **Computational methods for fluid flow (Springer Series in Computational Physics)**, Springer-Verlag, New York, 1983.

Rothman, L.S. The HITRAN 2008 Molecular Database, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 110, p. 533–572, 2009.

Rothman, L.S.; Camy-Peyret, C.; Flaud, J.M.; Gamache, R.R.; Goldman, A.; Goorvitch, D.; Hawkins, R.L.; Schroeder, J.; Selby, J.E.A.; Wattson, R.B. HITEMP, the High-Temperature Molecular Spectroscopic Database, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, 2002.

Salinas, C.T. Fast Approximate Technique for the Cumulative Wavenumber Model to Modeling Radiative Transfer in a Mixture of Real Gas Media, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 109, p. 2078-2093, 2008.

Schuster, A. Radiation Through a Foggy Atmosphere, **Astrophysics Journal**, v. 21, p. 1-22, 1905.

Schwarzschild, K. Equilibrium of the Sun's Atmosphere, *Ges. Wiss. Gottingen Nachr., Math-Phys. Klasse*, v. 1, p. 41-53, 1906.

Siegel, R.; Howell, J.R. **Thermal Radiation Heat Transfer**, Taylor & Francis, 4th edition, New York, 2002.

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

Solovjov, V.P.; Webb, B.W. SLW Modeling of Radiative Transfer in Multicomponent Gas Mixture, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 65, p. 655-672, 2000.

Solovjov, V.P.; Webb, B.W. A Local Spectrum Correlated Model for Radiative Transfer in Non-uniform Gas Media, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 73, p. 361-373, 2002.

Solovjov, V.P.; Webb, B.W. The Cumulative Wavenumber Method for Modeling Radiative Transfer in Gas Mixtures with Soot, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 93, p. 273-287, 2005.

Solovjov, V.P.; Webb, B.W. Multilayer Modeling of Radiative Transfer by SLW and CW Methods in Non-isothermal Gaseous Medium, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 109, p. 245-257, 2008.

Smith, T.F.; Shen, Z.F.; Friedman, J.N. Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of gray Gases Model, **Journal of Heat Transfer**, v. 104, p.602-608, 1982.

Smith, T.F.; Al-Turki, A.M.; Byun, K.H.; Kim, T.K. Radiative and Conductive Transfer for a Gas/Soot Mixture Between Diffuse Parallel Plates, **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 1, p. 50-55, 1987.

Solovjov, V.P.; Webb, B.W. SLW Modeling of Radiative Transfer in Multicomponent Gas Mixture, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 65, p. 655-672, 2000.

Syed, K.J.; Stewart, C.D.; Moss, J.B. Modeling Soot Formation and Thermal Radiation in Buoyant Turbulent Diffusion Flames, Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, p 1533-1541, 1990.

Takahashi, F.; Glasmann, I. Sooting correlations for premixed flames, **Combustion Science and Technology**, v. 37, p 1-15, 1984.

Tashkun, S.A.; Perevalov V.I.; Teffo J.L.; Bykov, A.D; Lavrentieva, N.N. CDSD-1000, the High- Temperature Carbon Dioxide Spectroscopic Databank, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 82, p. 165-196, 2003.

Vandsburger, U.; Kennedy, I.M.; Glassman, I. Sooting Counter-Flow Diffusion Flames with Varying Velocity Gradients, Twentieth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, p. 1105, 1984.

Wang, H.; Frenklach, M.A. Detailed Kinetic Modeling Study of Aromatics Formation in Laminar Premixed Acetylene and Ethylene Flames, **Combustion and Flame**, v. 110, p. 173-221, 1997.

Wang, A.; Modest, M.F. Photon Monte Carlo Simulation for Radiative Transfer in Gaseous Media Represented by Discrete Particle Fields, **Journal of Heat Transfer**, v. 128, p. 1041-1049, 2006.

Zhang, Z.; Ezekoye, O.A. Soot production rate calculations at elevated pressure in a methane-air jet diffusion flame, **Combustion Science and Technology**, v. 137, p. 323-346, 1998.

Zhou, L.X.; Quiao, L.; Chen, X.L.; Zhang, J. A USM turbulence-chemistry model for simulating NO_x formation in turbulent combustion, **Fuel**, v. 81, p. 1703-1709, 2002.

Zhou, L.X.; Zhang, Y.; Zhang, J. Simulation of swirling coal combustion using a full two-fluid model and an AUSM turbulence-chemistry model, **Fuel**, v. 82, p. 1001-1007, 2003.

APÊNDICE A – REAÇÕES QUÍMICAS USADAS NA MODELAGEM DA COMBUSTÃO DE METANO COM AR

O apêndice A mostra uma tabela com as reações químicas usadas nas simulações da combustão de metano com ar. Cada reação é acompanhada das constantes A , n e E , usadas na fórmula de Arrhenius para o cálculo do termo fonte das reações químicas.

$$k = AT^n \exp[-E / RT] \quad (\text{A.1})$$

Tabela A.1 – Mecanismos de reação usados nos cálculos das chamas.

N	Reação	A (mole $\text{cm}^3 \text{s}$)	n	E (KJ/mole)
1	$\text{O}_2 + \text{H} \rightarrow \text{OH} + \text{O}$	2×10^{14}	0	70,3
2	$\text{OH} + \text{O} \rightarrow \text{O}_2 + \text{H}$	$1,568 \times 10^{13}$	0	3,52
3	$\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}$	$5,06 \times 10^4$	2,67	26,30
4	$\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}$	$2,222 \times 10^4$	2,67	18,29
5	$\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	1×10^8	1,6	13,8
6	$\text{H}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{OH}$	$4,312 \times 10^8$	1,6	76,46
7	$\text{OH} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$1,5 \times 10^9$	1,14	0,42
8	$\text{H}_2\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	$1,473 \times 10^{10}$	1,14	71,09
9	$\text{O}_2 + \text{H} + \text{M} \rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}$	$2,3 \times 10^{18}$	-0,8	0
10	$\text{HO}_2 + \text{M} \rightarrow \text{O}_2 + \text{H} + \text{M}$	$3,19 \times 10^{18}$	-0,8	195,39
11	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	$1,5 \times 10^{14}$	0	4,2
12	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}_2$	$2,5 \times 10^{13}$	0	2,9
13	$\text{HO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	6×10^{13}	0	0
14	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	3×10^{13}	0	7,2
15	$\text{HO}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$	$1,8 \times 10^{13}$	0	-1,7
16	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	$2,5 \times 10^{11}$	0	-5,2
17	$\text{OH} + \text{OH} + \text{M} \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{M}$	$3,25 \times 10^{22}$	-2	0
18	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{OH} + \text{OH} + \text{M}$	$1,692 \times 10^{24}$	-2	202,29
19	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{OH}$	1×10^{13}	0	15
20	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	$5,4 \times 10^{12}$	0	4,2
21	$\text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH}$	$1,802 \times 10^{13}$	0	134,75

22	$\text{H} + \text{H} + \text{M} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	$1,8 \times 10^{18}$	-1	0
23	$\text{OH} + \text{H} + \text{M} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	$2,2 \times 10^{22}$	-2	0
24	$\text{O} + \text{O} + \text{M} \rightarrow \text{O}_2 + \text{M}$	$2,9 \times 10^{17}$	-1	0
25	$\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	$4,4 \times 10^6$	1,5	-3,10
26	$\text{CO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{OH}$	$4,956 \times 10^8$	1,5	89,76
27	$\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CHO} + \text{O}$	3×10^{13}	0	0
28	$\text{CO}_2 + \text{CH} \rightarrow \text{CHO} + \text{CO}$	$3,4 \times 10^{12}$	0	2,9
29	$\text{CHO} + \text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$	2×10^{14}	0	0
30	$\text{CHO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	1×10^{14}	0	0
31	$\text{CHO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{HO}_2$	3×10^{12}	0	0
32	$\text{CHO} + \text{M} \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{M}$	$7,1 \times 10^{14}$	0	70,30
33	$\text{CO} + \text{H} + \text{M} \rightarrow \text{CHO} + \text{M}$	$1,136 \times 10^{15}$	0	9,97
34	$\text{CH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CH} + \text{H}_2$	$8,4 \times 10^9$	1,5	1,4
35	$\text{CH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}$	$5,83 \times 10^9$	1,5	13,08
36	$\text{CH}_2 + \text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{H}$	8×10^{13}	0	0
37	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H} + \text{H}$	$6,5 \times 10^{12}$	0	6,3
38	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H} + \text{H}$	$6,5 \times 10^{12}$	0	6,3
39	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2$	$2,5 \times 10^{13}$	0	16,7
40	$\text{CH}_2\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2\text{O}$	$3,5 \times 10^{13}$	0	14,6
41	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2\text{O}$	3×10^{13}	0	5
42	$\text{CH}_2\text{O} + \text{M} \rightarrow \text{CHO} + \text{H} + \text{M}$	$1,4 \times 10^{17}$	0	320
43	$\text{CH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}_2$	$1,8 \times 10^{14}$	0	63
44	$\text{CH}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}$	$3,68 \times 10^{13}$	0	44,3
45	$\text{CH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_4$	$2,108 \times 10^{14}$	0	0
46	$\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	7×10^{13}	0	0
47	$\text{CH}_3 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$	$3,613 \times 10^{13}$	0	0
48	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	$3,4 \times 10^{11}$	0	37,4
49	$\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2$	$2,2 \times 10^4$	3	36,6
50	$\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$	$8,391 \times 10^2$	3	34,56
51	$\text{CH}_4 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{OH}$	$1,2 \times 10^7$	2,1	31,9
52	$\text{CH}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	$1,6 \times 10^6$	2,1	10,3
53	$\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_4 + \text{OH}$	$2,631 \times 10^5$	2,1	70,92
54	$\text{C}_2\text{H} + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}$	$1,1 \times 10^{13}$	0	12

55	$C_2H_2 + H \rightarrow C_2H + H_2$	$5,27 \times 10^{13}$	0	119,95
56	$C_2H + O_2 \rightarrow CHCO + O$	5×10^{13}	0	6,3
57	$CHCO + H \rightarrow CH_2 + CO$	3×10^{13}	0	0
58	$CH_2 + CO \rightarrow CHCO + H$	$2,361 \times 10^{12}$	0	-29,39
59	$CHCO + O \rightarrow CO + CO + H$	1×10^{14}	0	0
60	$C_2H_2 + O \rightarrow CH_2 + CO$	$4,1 \times 10^8$	1,5	7,1
61	$C_2H_2 + O \rightarrow CHCO + H$	$4,3 \times 10^{14}$	0	50,7
62	$C_2H_2 + OH \rightarrow C_2H + H_2O$	1×10^{13}	0	29,3
63	$C_2H + H_2O \rightarrow C_2H_2 + OH$	9×10^{12}	0	-15,98
64	$C_2H_2 + CH \rightarrow C_3H_3$	$2,1 \times 10^{14}$	0	-0,5
65	$C_2H_3 + H \rightarrow C_2H_2 + H_2$	3×10^{13}	0	0
66	$C_2H_3 + O_2 \rightarrow C_2H_2 + HO_2$	$5,4 \times 10^{11}$	0	0
67	$C_2H_3 \rightarrow C_2H_2 + H$	2×10^{14}	0	166,29
68	$C_2H_2 + H \rightarrow C_2H_3$	$1,053 \times 10^{14}$	0	3,39
69	$C_2H_4 + H \rightarrow C_2H_3 + H_2$	$1,5 \times 10^{14}$	0	42,7
70	$C_2H_3 + H_2 \rightarrow C_2H_4 + H$	$9,605 \times 10^{12}$	0	32,64
71	$C_2H_4 + O \rightarrow CH_3 + CO + H$	$1,6 \times 10^9$	1,2	3,1
72	$C_2H_4 + OH \rightarrow C_2H_3 + H_2O$	3×10^{13}	0	12,6
73	$C_2H_3 + H_2O \rightarrow C_2H_4 + OH$	$8,283 \times 10^{12}$	0	65,2
74	$C_2H_4 + M \rightarrow C_2H_2 + H_2 + M$	$2,5 \times 10^{17}$	0	319,8
75	$C_2H_5 + H \rightarrow CH_3 + CH_3$	3×10^{13}	0	0
76	$CH_3 + CH_3 \rightarrow C_2H_5 + H$	$3,547 \times 10^{12}$	0	49,68
77	$C_2H_5 + O_2 \rightarrow C_2H_4 + HO_2$	2×10^{12}	0	20,9
78	$C_2H_5 \rightarrow C_2H_4 + H$	2×10^{13}	0	166
79	$C_2H_4 + H \rightarrow C_2H_5$	$3,189 \times 10^{13}$	0	12,61
80	$C_2H_6 + H \rightarrow C_2H_5 + H_2$	$5,4 \times 10^2$	3,5	21,8
81	$C_2H_6 + O \rightarrow C_2H_5 + OH$	3×10^7	2	21,4
82	$C_2H_6 + OH \rightarrow C_2H_5 + H_2O$	$6,3 \times 10^6$	2	2,7
83	$C_3H_3 + O_2 \rightarrow CHCO + CH_2O$	6×10^{12}	0	0
84	$C_3H_3 + O \rightarrow C_2H_3 + CO$	$3,8 \times 10^{13}$	0	0
85	$C_3H_4 \rightarrow C_3H_3 + H$	5×10^{14}	0	370
86	$C_3H_3 + H \rightarrow C_3H_4$	$1,7 \times 10^{13}$	0	19,88
87	$C_3H_4 + O \rightarrow C_2H_2 + CH_2O$	1×10^{12}	0	0

88	$C_3H_4 + O \rightarrow C_2H_3 + CHO$	1×10^{12}	0	0
89	$C_3H_4 + OH \rightarrow C_2H_3 + CH_2O$	1×10^{12}	0	0
90	$C_3H_4 + OH \rightarrow C_2H_4 + CHO$	1×10^{12}	0	0
91	$C_3H_5 \rightarrow C_3H_4 + H$	$3,98 \times 10^{13}$	0	293,1
92	$C_3H_4 + H \rightarrow C_3H_5$	$1,267 \times 10^{13}$	0	32,48
93	$C_3H_5 + H \rightarrow C_3H_4 + H_2$	1×10^{13}	0	0
94	$C_3H_6 \rightarrow C_2H_3 + CH_3$	$3,15 \times 10^{15}$	0	359,3
95	$C_2H_3 + CH_3 \rightarrow C_3H_6$	$2,511 \times 10^{12}$	0	-34,69
96	$C_3H_6 + H \rightarrow C_3H_5 + H_2$	5×10^{12}	0	6,3
97	$n-C_3H_7 \rightarrow C_2H_4 + CH_3$	$9,6 \times 10^{13}$	0	129,8
98	$n-C_3H_7 \rightarrow C_3H_6 + H$	$1,25 \times 10^{14}$	0	154,9
99	$C_3H_6 + H \rightarrow n-C_3H_7$	$4,069 \times 10^{14}$	0	21,49
100	$i-C_3H_7 \rightarrow C_2H_4 + CH_3$	$6,3 \times 10^{13}$	0	154,5
101	$i-C_3H_7 + O_2 \rightarrow C_3H_6 + HO_2$	1×10^{12}	0	20,9
102	$C_3H_8 + H \rightarrow n-C_3H_7 + H_2$	$1,3 \times 10^{14}$	0	40,6
103	$C_3H_8 + H \rightarrow i-C_3H_7 + H_2$	1×10^{14}	0	34,9
104	$C_3H_8 + O \rightarrow n-C_3H_7 + OH$	3×10^{13}	0	24,1
105	$C_3H_8 + O \rightarrow i-C_3H_7 + OH$	$2,6 \times 10^{13}$	0	18,7
106	$C_3H_8 + OH \rightarrow n-C_3H_7 + H_2O$	$3,7 \times 10^{12}$	0	6,9
107	$C_3H_8 + OH \rightarrow i-C_3H_7 + H_2O$	$2,8 \times 10^{12}$	0	3,6
108	$CH_2OH + H \rightarrow CH_2O + HO_2$	3×10^{13}	0	0
109	$CH_2OH + O_2 \rightarrow CH_2O + HO_2$	1×10^{13}	0	30,1
110	$CH_2OH + M \rightarrow CH_2O + H + M$	1×10^{14}	0	105,1
111	$CH_3OH + H \rightarrow CH_2OH + H_2$	4×10^{13}	0	25,5
112	$CH_3OH + OH \rightarrow CH_2OH + H_2O$	1×10^{13}	0	7,1

$[M] = 6,5[CH_4] + 6,5[H_2O] + 1,5[CO_2] + 0,75[CO] + 0,4[O_2] + 0,4[N_2] + 1,0[outro]$

APÊNDICE B – COMPARAÇÃO ENTRE OS BANCOS DE DADOS ESPECTRAIS HITRAN E HITEMP

Os bancos de dados espectrais HITRAN e HITEMP servem para descrever o comportamento molecular dos gases em função do número de onda. No processo de transferência de calor por radiação térmica, servem para definir o comportamento do coeficiente de absorção dos gases, que é usado na equação do transporte radiante. O banco de dados HITRAN foi obtido através de medições na temperatura ambiente (296 K), enquanto que são usadas relações matemáticas para as temperaturas mais elevadas. Neste banco de dados, existem dados de várias moléculas, como comentado na seção 3.2. Por outro lado, o banco de dados HITEMP, os dados foram obtidos na temperatura de 1000 K. Assim, o uso desse banco de dados é mais apropriado para cálculos que envolvam combustão, pois a temperatura dentro de fornos de combustão está em torno de 1800 K. As figuras a seguir mostram uma comparação entre os espectros obtidos pelo HITRAN e pelo HITEMP para as moléculas de CO₂, onde na Figura B.1, a temperatura do gás é de 750 K, enquanto que na Figura B.2 a temperatura é de 2000 K.

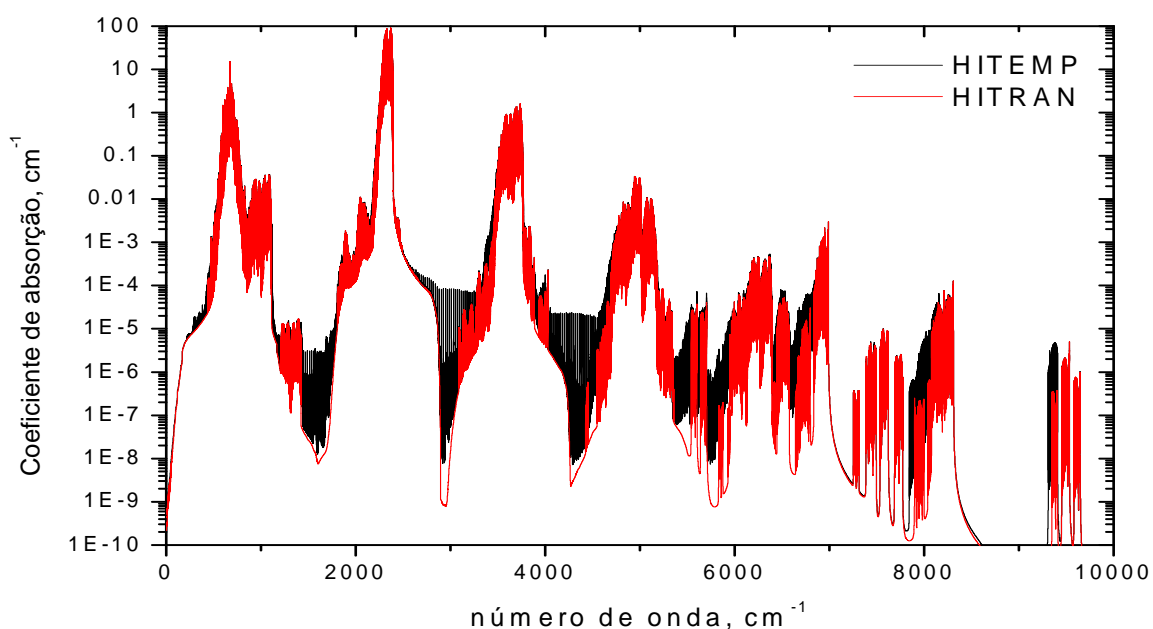


Figura B.1 – Espectro obtido para 100% CO₂ (temperatura de 750 K).

Conforme comentado por Solovjov e Webb, 2002, existe pouca diferença entre os bancos de dados HITRAN e HITEMP para temperaturas inferiores a 1000 K, exceto para algumas faixas espectrais, pois o banco de dados HITEMP possui significativamente mais

dados espectrais na faixa 0-10000 cm^{-1} do que o HITRAN, assim nessas regiões do espectro a diferença é grande, conforme pode ser visto na Figura B.1. Para temperaturas mais elevadas, a diferença se acentua, conforme pode ser visto na Figura B.2 há significativas diferenças nos resultados gerados para o coeficiente de absorção nos dois bancos de dados. Isso ocorre por que as relações matemáticas usadas não são válidas para temperaturas que se afastam muito das temperaturas em que os dados são obtidos. Assim os resultados gerados pelo HITEMP são mais confiáveis, pois os dados foram obtidos na temperatura de 1000K, enquanto que os do HITRAN foram obtidos na temperatura de 296 K.

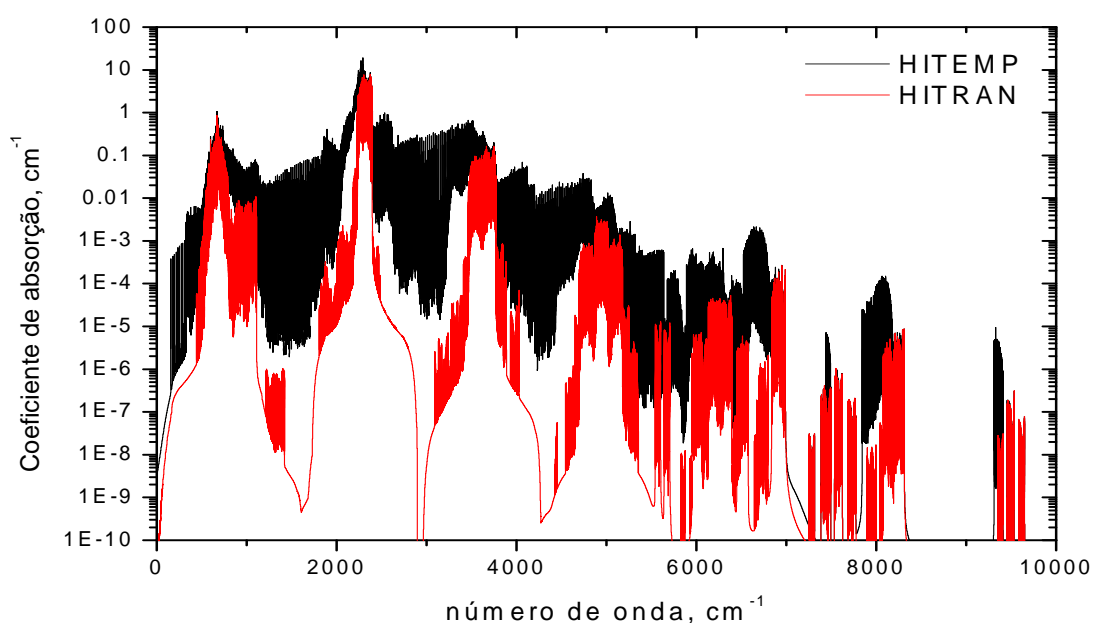


Figura B.2 – Espectro obtido para 100% CO_2 (temperatura de 2000 K).

Modelos para a transferência de calor por radiação como o SLW e o CW usam uma hipótese de que para diferentes concentrações, o espectro dos gases sofre mudança apenas na amplitude, isto é, negligência-se a parcela de alargamento pelas próprias moléculas. A Figura B.3 mostra uma comparação dessa hipótese entre os gases CO_2 e H_2O , que são os principais gases resultantes da queima de hidrocarbonetos. Primeiro, calcula-se o espectro de um gás considerando uma concentração qualquer (P_{sI}), isto é, substituindo pelo valor P_s na seguinte relação:

$$\kappa_\eta = \sum_i \frac{S_i}{\pi} \frac{\gamma_i}{\gamma_i^2 + (\eta - \eta_i)^2} \quad (\text{B.1})$$

onde

$$\gamma = \left(\frac{T_{\text{ref}}}{T} \right)^n P_s \gamma_{\text{self}} + (1 - P_s) \gamma_{\text{ar}} \quad (\text{B.2})$$

Em seguida, calcula-se o espectro do gás considerando uma concentração de 100% ($P_{s2}=1$). Assim, multiplica-se o resultado obtido para a concentração de 100% por P_{s1} para verificar a dependência espectral em relação à concentração.

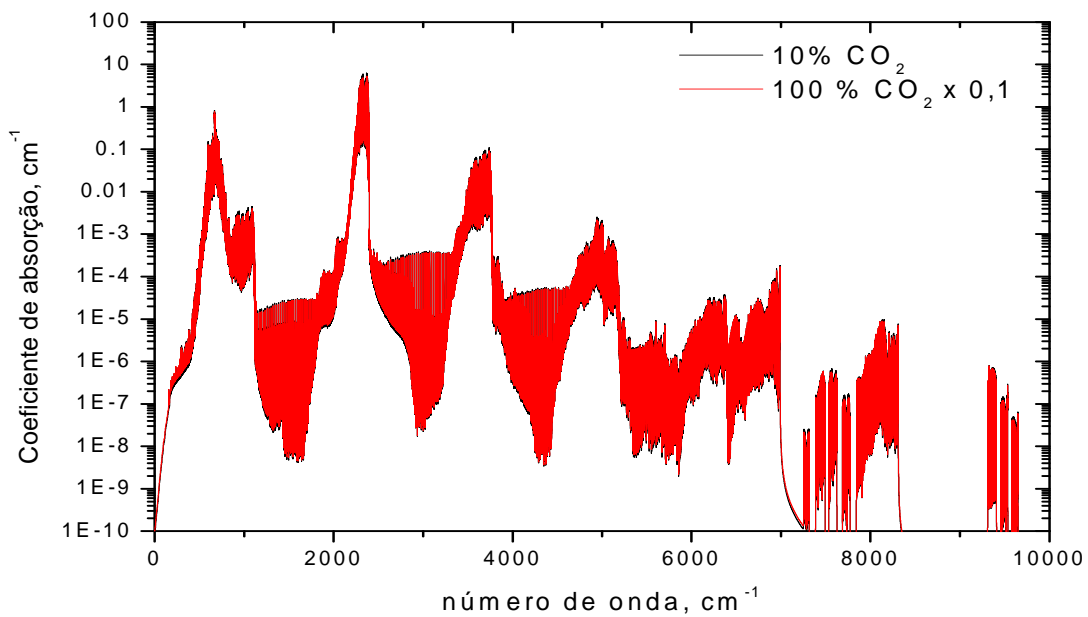


Figura B.3 – Dependência do coeficiente de absorção das moléculas de CO₂ em relação à concentração na temperatura de 1000 K (HITEMP).

A Figura B.3 mostra que a parcela de alargamento pelas próprias moléculas é insignificante para o CO₂, portanto a hipótese pode ser perfeitamente aplicada, pois para concentrações menores que 100%, considerando CO₂, basta multiplicar o coeficiente de absorção pela concentração do gás que as mudanças no resultado serão insignificantes. Mas se o meio contiver a presença de H₂O, a aplicação dessa hipótese gera resultados não confiáveis, pois como pode ser visto na Figura B.4, a parcela de alargamento próprio para as moléculas de H₂O alteram significativamente o coeficiente de absorção, então na presença de H₂O, o espectro deve ser considerado para diferentes concentrações.

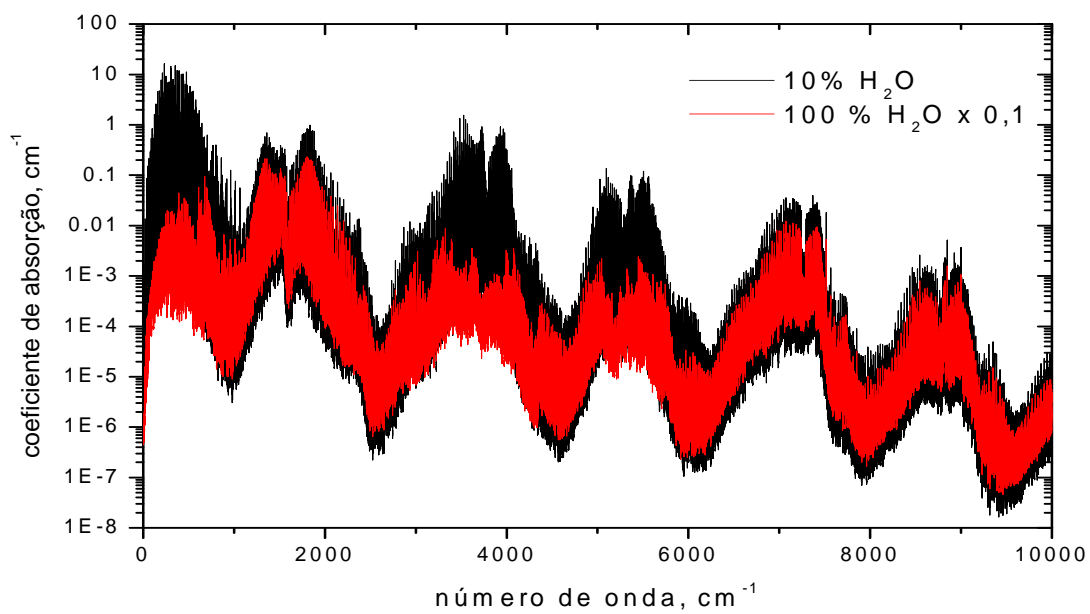


Figura B.4 – Dependência do coeficiente de absorção das moléculas de H_2O em relação à concentração na temperatura de 1000 K (HITEMP).