

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

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

por

Felipe Roman Centeno

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, abril de 2014

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

por

Felipe Roman Centeno
Mestre em Engenharia Mecânica

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

Coorientador: Prof. Dr. Cristiano Vitorino da Silva

Aprovada por:

Prof. Dr. Elizaldo Domingues dos Santos, FURG

Profa. Dr. Fernando Marcelo Pereira, UFRGS

Prof. Dr. Helcio Rangel Barreto Orlande, UFRJ

Profa. Dra. Thamy Cristina Hayashi, UFRGS

Prof. Dr. Rogério José Marczak
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 7 de abril de 2014

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha família por todo apoio e compreensão; pela paciência comigo, principalmente naqueles momentos em que o estresse físico e mental criados por conta de altas doses de estudos me tornavam uma pessoa não muito sociável.

Agradeço a minha namorada, esposa, companheira e amiga, Nicole, pelo incentivo e apoio, mesmo naqueles momentos, que não eram poucos, em que eu não tive tempo para aproveitar adequadamente os nossos momentos.

Agradeço ao professor, orientador educacional e, principalmente, amigo, Francis H. R. França, pois certamente sem o empenho e a confiança deste, depositada em mim, este trabalho não teria sido possível. Ao professor Cristiano Vitorino da Silva, pela coorientação do trabalho. Ao professor Paulo S. Schneider, pelo apoio e incentivo ao início da minha jornada acadêmica.

Aos colegas da UNISINOS.

Aos professores da comissão de avaliação, os quais se disponibilizaram a contribuir com este trabalho e com a minha formação.

Aos amigos e colegas, os quais em muitos momentos me incentivaram, auxiliaram e ensinaram. Com certeza o apoio deles me ajudou na realização deste trabalho, em especial ao pessoal do GESTE, entre os quais eu gostaria de mencionar o Anderson Mossi (*in memoriam*) e o Rogério Brittes.

A todos funcionários e professores do PROMEC/UFRGS.

RESUMO

Este trabalho analisa numericamente a transferência de calor radiativa em uma chama turbulenta de metano-ar. São resolvidas equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia, espécies químicas gasosas e fuligem, e variância da flutuação de temperatura em coordenadas cilíndricas axissimétricas. O modelo de combustão é o *Eddy Break-Up* – Arrhenius, com reação de combustão em duas etapas. O modelo de turbulência é o $k-\varepsilon$ padrão. A modelagem das interações turbulência-radiação (TRI - do inglês: *Turbulence-Radiation Interactions*) considera a “correlação combinada entre coeficiente de absorção e temperatura” e a “autocorrelação de temperatura”. O termo fonte de calor radiativo é calculado com o método de ordenadas discretas, considerando os modelos de gás cinza (GC) e da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG – do inglês: *weighted-sum-of-gray-gases*) com correlações clássicas e recentes. O modelo linha-por-linha, considerado *benchmark*, também é empregado no cálculo daquele termo fonte, porém em cálculos desacoplados entre radiação e dinâmica de fluidos computacional (CFD - do inglês: *Computational Fluid Dynamics*), com o objetivo de avaliar os modelos WSGG e GC. Primeiramente, estudou-se o efeito da radiação térmica dos gases H₂O e CO₂ através dos modelos GC e WSGG, em cálculos acoplados radiação-CFD. Os resultados mostraram que os campos de temperatura e do termo fonte de calor radiativo, a transferência de calor para a parede da câmara e a fração radiativa, foram sensíveis aos diferentes modelos, enquanto o efeito sobre as concentrações das espécies foi de menor relevância para o modelo de combustão considerado. Os resultados obtidos com o modelo WSGG mais recente ficaram mais próximos dos dados experimentais da literatura, enquanto que a consideração das interações TRI melhorou esta concordância. As principais contribuições das interações TRI foram sobre a temperatura máxima e a fração radiativa, concordando com resultados da literatura. Os efeitos radiativos da fuligem juntamente com os gases também foram estudados, sendo importantes sobre o termo fonte de calor radiativo somente na região onde a fuligem estava presente (aumento de 30%). O fluxo de calor radiativo sobre a parede radial da câmara aumentou 25% na região de maior concentração de fuligem. A contribuição dos gases para a transferência radiativa foi de 92% e a da fuligem foi de 8%. Ao comparar os resultados dos modelos WSGG e GC com a solução *benchmark*, considerando o meio composto por gases, o modelo WSGG mais recente foi o que apresentou os melhores resultados (erro máximo 22,49%, médio 4,72%), enquanto ao considerar o meio composto por gases e fuligem, os erros foram menores (máximo 11,07%, médio 2,95%).

Palavras-chave: Radiação, Modelos espectrais, Interações Turbulência-Radiação, Combustão.

ABSTRACT

This work analyses numerically the thermal radiation heat transfer on a methane-air turbulent non-premixed flame. Conservation equations for mass, momentum, gaseous chemical species and soot, energy, and temperature variance, are solved in axisymmetric coordinates. The combustion model is Eddy Break-Up – Arrhenius, with two steps for the combustion reaction. Turbulence is modeled by standard $k-\varepsilon$ model. Consideration of TRI (Turbulence-Radiation Interactions) effects is made through a methodology that considers both cross-correlation between absorption coefficient and temperature and temperature self-correlation. The radiative heat source term is calculated with the discrete ordinates method, considering the gray gas model (GG) and the weighted-sum-of-gray-gases model (WSGG) based on classical and recent correlations. The benchmark solution obtained by the line-by-line model is also employed to calculate that source term, but in decoupled radiation-CFD (Computational Fluid Dynamics) calculations, with the objective of evaluating WSGG and GG models. Firstly, it was studied the effects of thermal radiation from the gases H₂O and CO₂ employing GG and WSGG models, and then the influence of TRI was also studied, both in coupled radiation-CFD calculations. Results pointed that temperature and radiative heat source fields, as well as wall heat transfer rates and radiative fraction, were significantly affected by thermal radiation, as well as by the different models and by TRI, while the influence on species concentrations was minor, for the combustion model employed. Numerical results obtained considering the recent WSGG model correlations were closer to experimental data from literature, and consideration of TRI into calculations improved that agreement. The main TRI contributions were the decrease on flame peak temperature and the increase on radiative fraction, in agreement with literature data. Radiative effects of the mixture of soot and gases were also studied, showing to be important for the radiative heat source only in the region with presence of soot (increase of 30%). Radiative heat flux on chamber wall increased 25% locally in the region with the highest soot concentration. Contribution of gases and soot for the net radiative transfer was 92% and 8%. Comparing the results obtained with WSGG and GG models with the benchmark solution in decoupled radiation-CFD calculations, considering the media composed by CO₂ and H₂O, the recent WSGG reached the best results (maximum error of 22.49%, average error of 4.72%), while considering the media composed by gases and soot, errors were reduced (maximum of 11.07% and average of 2.95%).

Keywords: Radiation, Spectral models, Turbulence-Radiation Interactions, Combustion.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Motivação	1
1.2	Revisão bibliográfica	2
1.3	Contribuição do trabalho	12
1.4	Organização do texto	15
2	EQUAÇÕES GOVERNANTES DO PROCESSO DE COMBUSTÃO TURBULENTA DE GASES	17
2.1	Equação da conservação de massa	22
2.2	Equação da conservação de quantidade de movimento	22
2.3	Turbulência: modelagem e funções de parede	23
2.3.1	Modelo $k-\varepsilon$	24
2.3.2	Funções de parede	25
2.4	Equação da conservação da massa das espécies químicas	26
2.4.1	Formação e oxidação de fuligem	29
2.5	Equação da conservação de energia	33
3	RADIAÇÃO TÉRMICA	35
3.1	Corpo negro	36
3.2	Intensidade de radiação	37
3.3	Intensidade de radiação em meios participantes	39
3.3.1	Atenuação da intensidade de radiação devido à absorção e ao espalhamento	40
3.3.2	Aumento da intensidade de radiação devido à emissão	44
3.3.3	Aumento da intensidade de radiação devido ao espalhamento	46
3.3.4	Equação de transferência radiativa	48
3.4	Modelos espectrais do coeficiente de absorção dos gases	49
3.4.1	Modelo linha-por-linha	55
3.4.2	Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza	58
3.4.3	Modelo de gás cinza	60
3.5	Radiação da fuligem	62
3.6	Interações Turbulência-Radiação	65

4	MÉTODOS NUMÉRICOS DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES GOVERNANTES ...	78
4.1	Método de volumes finitos	78
4.2	Métodos de solução da equação de transferência radiativa	84
4.2.1	Método de ordenadas discretas	85
4.2.2	Outros métodos de solução da ETR	92
4.2.2.1	Método de harmônicas esféricas – Aproximações P-N	92
4.2.2.2	Método das Zonas	92
4.2.2.3	Método de Transferência Discreta de Radiação	93
4.2.2.4	Método de Monte Carlo	93
4.3	Detalhes da implementação	94
5	VERIFICAÇÃO E VALIDAÇÃO	97
5.1	O problema abordado	97
5.2	Condições de contorno	99
5.3	Propriedades termofísicas	101
5.4	Estudo de convergência de malha	103
5.5	Verificação do balanço de energia na câmara	107
5.6	Influência de variações nas condições turbulentas de entrada	108
5.7	Verificação da importância das forças de empuxo	110
5.8	Comparação com resultados da literatura	110
6	RESULTADOS	114
6.1	Comparação de diferentes modelos WSGG e GC para o cálculo da radiação térmica	114
6.1.1	Avaliação dos modelos WSGG e GC em geometria cilíndrica axissimétrica aplicados em meio participante não-isotérmico composto por H ₂ O e CO ₂ : comparação com resultados <i>benchmark</i> LBL	125
6.2	Avaliação da influência das Interações Turbulência-Radiação	129
6.3	Contribuição da fuligem para a transferência de calor radiativa	141
6.3.1	Avaliação do modelo WSGG em geometria cilíndrica axissimétrica aplicado em meio participante não-isotérmico composto por H ₂ O, CO ₂ e fuligem: comparação com resultados <i>benchmark</i> LBL	150
7	CONCLUSÕES	155
7.1	Sugestões de trabalhos futuros	158
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	160

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Predições (linhas sólidas) e medições (símbolos) de perfis de concentrações de fuligem usando diferentes modelos de formação de fuligem: (i) Khan e Greeves, 1974, (ii) Stewart et al., 1991, e (iii) Fairweather et al., 1992 [Coelho e Carvalho, 1995]	31
Figura 3.1	Intensidade de radiação a partir de uma fonte em dA_s que incide em uma área dA_l [Siegel e Howell, 2002]	38
Figura 3.2	Variação do fluxo de energia com a distância da fonte (adaptado de Siegel e Howell, 2002)	39
Figura 3.3	Intensidade incidente normalmente sobre um elemento de volume de espessura dS que absorve e espalha [Siegel e Howell, 2002]	41
Figura 3.4	Geometria utilizada para dedução do aumento de intensidade de radiação devido à emissão em um meio participante (adaptado de Siegel e Howell, 2002)	45
Figura 3.5	Espalhamento de intensidade de radiação incidente dentro do ângulo sólido $d\omega_i$ para a direção (θ, φ) (adaptado de Siegel e Howell, 2002)	46
Figura 3.6	Espalhamento de energia para dentro da direção S [Siegel e Howell, 2002]	47
Figura 3.7	Espectro do coeficiente de absorção de H_2O para $T = 2000$ K e $p_{H_2O} = 0,1$ atm (adaptado de Mossi et al., 2012)	50
Figura 4.1	Volume de controle genérico e seus vizinhos para situação bidimensional	79
Figura 4.2	Sistemas espacial e direcional de coordenadas para geometria cilíndrica (adaptado de Menart, 2000)	89
Figura 4.3	Volume de controle e cossenos diretores para os cálculos DOM (adaptado de Kaplan et al., 1994)	90
Figura 5.1	Representação esquemática da câmara de combustão em estudo	98
Figura 5.2	Malha com 48×140 volumes utilizada nos cálculos	106
Figura 5.3	Perfis de temperatura na linha de centro da câmara de combustão	112
Figura 5.4	Perfis de frações mássicas de CH_4 na linha de centro da câmara de combustão	112

Figura 5.5	Perfis de frações mássicas de CO_2 na linha de centro da câmara de combustão	112
Figura 5.6	Perfis de frações mássicas de O_2 na linha de centro da câmara de combustão	113
Figura 5.7	Perfis de frações mássicas de CO na linha de centro da câmara de combustão	113
Figura 6.1	Campos de temperatura: (a) sem radiação; (b) radiação calculada com modelo WSGG de Smith et al., 1982; (c) radiação calculada com modelo WSGG de Dorigon et al., 2013; (d) radiação calculada com modelo GC de Cassol et al., 2014. Campos de termo fonte de calor radiativo: (e) radiação calculada com modelo WSGG de Smith et al., 1982; (f) radiação calculada com modelo WSGG de Dorigon et al., 2013; (g) radiação calculada com modelo GC de Cassol et al., 2014	116
Figura 6.2	Perfis axiais de temperatura e de frações molares de CH_4 , CO_2 , H_2O , O_2 e de CO ao longo da linha de centro da câmara	118
Figura 6.3	Perfis radiais de temperatura e de frações molares de O_2 , CO_2 , e de H_2O na posição axial $z = 0,312$ m	119
Figura 6.4	Perfis radiais de temperatura e de frações molares de O_2 , CO_2 , e de H_2O na posição axial $z = 0,912$ m	119
Figura 6.5	Perfis radiais de temperatura e de frações molares de O_2 , CO_2 , e de H_2O na posição axial $z = 1,312$ m	120
Figura 6.6	Distribuições das frações molares das espécies químicas: (a) H_2O , (b) CO_2 ; (c) razão entre as frações molares de H_2O e de CO_2	122
Figura 6.7	Perfis axiais do termo fonte de calor radiativo ao longo da linha de centro da câmara obtidos empregando os modelos (a) WSGG Smith et al., 1982, (b) WSGG Dorigon et al., 2013, e (c) GC Cassol et al., 2014, ambos considerando e desprezando a não-homogeneidade das concentrações de H_2O e CO_2 no cálculo da radiação térmica	124
Figura 6.8	Perfis do termo fonte radiativo calculados com os modelos LBL, WSGG e GC na direção axial e radial	126

Figura 6.9	Comparação entre os resultados obtidos para o campo do termo fonte radiativo: (a) termo fonte radiativo obtido com o modelo LBL, (b) erro relativo% entre o termo fonte radiativo obtido com o modelo LBL e o modelo WSGG de Smith et al., 1982, (c) erro relativo% entre o termo fonte radiativo obtido com o modelo LBL e o modelo WSGG de Dorigon et al., 2013, (d) erro relativo% entre o termo fonte radiativo obtido com o modelo LBL e o modelo GC de Cassol et al., 2014	127
Figura 6.10	Campos de temperatura: (a) sem radiação; (b) radiação calculada sem TRI; (c) radiação calculada com TRI; (d) flutuações de temperatura, $\sqrt{T'^2}$. Campos de termo fonte radiativo: (e) radiação calculada sem TRI; (f) radiação calculada com TRI; (g) desvio relativo percentual entre (e) e (f), calculado com a Eq. (6.2)	130
Figura 6.11	Perfis axiais do termo fonte de calor radiativo ao longo da linha de centro da câmara	132
Figura 6.12	Perfis de temperatura ao longo das direções axial e radial: temperatura média (\bar{T}) e somatório da temperatura média com o valor <i>rms</i> da flutuação de temperatura ($\bar{T} + \sqrt{T'^2}$)	133
Figura 6.13	Perfis axiais de temperatura e de frações molares de CH ₄ , CO ₂ , H ₂ O, O ₂ e de CO ao longo da linha de centro da câmara	134
Figura 6.14	Perfis radiais de temperatura e de frações molares de O ₂ , CO ₂ , e de H ₂ O na posição axial $z = 0,312$ m	135
Figura 6.15	Perfis radiais de temperatura e de frações molares de O ₂ , CO ₂ , e de H ₂ O na posição axial $z = 0,912$ m	136
Figura 6.16	Perfis radiais de temperatura e de frações molares de O ₂ , CO ₂ , e de H ₂ O na posição axial $z = 1,312$ m	136
Figura 6.17	Campos de energia cinética turbulenta para os diferentes cenários radiativos: (a) sem radiação; (b) radiação calculada sem TRI; (c) radiação calculada com TRI	140
Figura 6.18	Campos do valor <i>rms</i> das flutuações de temperatura, $\sqrt{T'^2}$, para os diferentes cenários radiativos: (a) sem radiação; (b) radiação calculada sem TRI; (c) radiação calculada com TRI	140

Figura 6.19	Termo fonte de calor radiativo: (a) com radiação somente dos gases, (b) com radiação da fuligem e dos gases, (c) desvio relativo entre (a) e (b) calculado pela Eq. (6.3)	142
Figura 6.20	Campos de frações molares de H ₂ O e de CO ₂ , e campo de fração volumétrica de fuligem, obtidos com o terceiro cenário radiativo	144
Figura 6.21	Perfis de fração volumétrica de fuligem na direção axial na linha de centro da câmara e na direção radial na posição axial $z = 1,4$ m, correspondente ao ponto de máxima concentração de fuligem	144
Figura 6.22	Campos de temperatura: (a) sem radiação; (b) radiação calculada somente com os gases; (c) radiação calculada com gases e fuligem	145
Figura 6.23	Perfis de temperatura na direção axial ao longo da linha de centro da câmara e na direção radial nas diferentes posições axiais	146
Figura 6.24	Fluxo de calor radiativo sobre a parede radial da câmara de combustão	149
Figura 6.25	Perfis do termo fonte radiativo calculados com os modelos LBL e WSGG	151
Figura 6.26	Comparação entre os resultados obtidos para o campo do termo fonte radiativo: (a) termo fonte radiativo obtido com o modelo LBL, (b) erro relativo percentual entre o termo fonte radiativo obtido com o modelo LBL e o modelo WSGG	152

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1	Coeficientes do modelo WSGG para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ [Smith et al., 1982]	59
Tabela 3.2	Coeficientes do modelo WSGG para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ [Dorigon et al., 2013]	60
Tabela 3.3	Coeficientes polinomiais para o cálculo do coeficiente de absorção para o modelo GC [Cassol et al., 2014]	61
Tabela 3.4	Coeficientes do modelo WSGG para fuligem [Cassol, 2013]	65
Tabela 4.1	Identificação da variável genérica, ϕ , coeficiente difusivo, Γ_ϕ , e termos fontes, $\overline{S^\phi}$, das equações de conservação que modelam o processo de combustão turbulenta	80
Tabela 4.2	Cossenos diretores para a aproximação S_6 para geometria bidimensional	88
Tabela 5.1	Entalpia molar de formação padrão a 298,15 K e 1 atm [Turns, 2000] ..	102
Tabela 5.2	Parâmetros de cada reação para cálculo da taxa pelo modelo de Arrhenius [Turns, 2000; Nieckele et al., 2001; Silva, 2005; Silva et al., 2007]	102
Tabela 5.3	Fração radiativa, temperatura máxima e frações molares máximas de CO_2 e H_2O para diferentes malhas	103
Tabela 5.4	Índice de convergência de malha para as variáveis: fração radiativa, temperatura máxima e frações molares máximas de CO_2 e H_2O	105
Tabela 5.5	Análise do balanço de energia na câmara de combustão	107
Tabela 5.6	Efeito da variação das condições de contorno na entrada da câmara (intensidade de turbulência nas correntes de ar e de combustível) sobre as variáveis-chave da simulação: f_{rad} , T_{max} , $x_{CO_2,max}$ e $x_{H_2O,max}$	109
Tabela 5.7	Efeito da variação das condições de contorno na entrada da câmara (comprimento característico da escala de turbulência nas correntes de ar e de combustível) sobre as variáveis-chave da simulação: f_{rad} , T_{max} , $x_{CO_2,max}$ e $x_{H_2O,max}$	109
Tabela 6.1	Temperatura máxima na chama para os quatro cenários radiativos estudados	117

Tabela 6.2	Desvios percentuais médios entre os resultados numéricos de temperatura e os dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994, para os quatro cenários radiativos estudados	121
Tabela 6.3	Taxa de transferência de calor na parede cilíndrica da câmara de combustão para os quatro cenários radiativos estudados	122
Tabela 6.4	Predições da taxa líquida de transferência radiativa e da fração radiativa	123
Tabela 6.5	Temperatura máxima e fração radiativa para os casos considerando e desprezando a não-homogeneidade das concentrações de H ₂ O e CO ₂ no cálculo da radiação	124
Tabela 6.6	Erros máximos e médios do termo fonte radiativo para cada modelo em relação ao resultado <i>benchmark</i> (LBL)	128
Tabela 6.7	Temperatura máxima na chama para os três cenários radiativos estudados	131
Tabela 6.8	Desvios percentuais médios entre os resultados numéricos de temperatura e os dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994, para os três cenários radiativos estudados	137
Tabela 6.9	Taxa de transferência de calor na parede cilíndrica da câmara de combustão para os três cenários radiativos estudados	138
Tabela 6.10	Predições da taxa líquida de transferência radiativa e da fração radiativa	139
Tabela 6.11	Temperatura máxima na chama para os três cenários radiativos estudados	146
Tabela 6.12	Taxa de transferência de calor na parede cilíndrica da câmara de combustão para os três cenários radiativos estudados	148
Tabela 6.13	Predições da taxa líquida de transferência radiativa e da fração radiativa	149
Tabela 6.14	Erros máximos e médios do termo fonte radiativo do modelo WSGG em relação ao resultado <i>benchmark</i> (LBL), para os cenários de cálculo radiativo com e sem a participação da fuligem	154

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

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

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

LISTA DE SÍMBOLOS

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

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

o	fronteira oeste do volume P
O ₂	oxigênio
P	ponto central do volume de controle
p	pressão, Pa
p	pressão parcial, Pa ou atm
p	ordem de convergência utilizada no cálculo do GCI
p*	pressão modificada, Pa
Pe	número de Peclet [$VL \cdot \alpha^{-1}$]
p _{CO₂}	pressão parcial de CO ₂ , atm
p _{H₂O}	pressão parcial de H ₂ O, atm
P _k	termo de produção ou dissipação da energia cinética turbulenta, W·m ⁻³
Pr	número de Prandtl [$c_p \mu \cdot k^{-1}$]
Pr _t	número de Prandtl turbulento
p _s	pressão parcial da espécie participante, atm
pS	produto da pressão pelo caminho, atm·m
Q	taxa de energia, W
q	fluxo de calor, W·m ⁻²
R	constante universal dos gases, kJ·kmol ⁻¹ ·K ⁻¹
R	taxa líquida de reação, kg·m ⁻³ ·s ⁻¹
r	direção radial, m
r	expoente da razão de equivalência no modelo de Khan e Greeves
r	razão entre o número de volumes utilizada no cálculo do GCI
Re	número de Reynolds [$\rho VL \cdot \mu^{-1}$]
S	distância ou posição espacial, m
S	volume abaixo do volume P
s	direção de um feixe
s	fronteira sul do volume P
s	seção-transversal de espalhamento, m ² ·partícula ⁻¹
Sc	número de Schmidt [$\nu \cdot D^{-1}$]
Sc _t	número de Schmidt turbulento
\dot{S}^ϕ	termo fonte genérico da equação de conservação da variável ϕ

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

Símbolos Gregos

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

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

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

Super-índices

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

Sub-índices

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

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

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

O atual estado de desenvolvimento econômico do país e do mundo faz com que a demanda por energia atinja altos níveis. Para satisfazer essa demanda, estima-se que cerca de 80% da energia utilizada nos transportes (automóveis, aviões, trens, navios, etc.), na produção de energia elétrica e de energia térmica seja proveniente de processos de combustão [Brasil, 2013]. Assim, melhorar a eficiência de tais processos, mesmo que em baixos percentuais, como 1,0% ou 2,0%, pode ser equivalente às contribuições de outras fontes de energia para a matriz energética.

Maiores eficiências em processos de combustão, além de melhorias relacionadas ao meio ambiente, levam também a maiores ganhos financeiros por parte das indústrias e de todos os setores envolvidos. Estes ganhos podem estar relacionados à economia de energia elétrica, à redução no uso de combustíveis, ao aumento de produtividade, à redução na emissão de gases poluentes, etc.

O entendimento e o desenvolvimento de modelos matemáticos para análise da transferência de calor em problemas de combustão é de grande importância, uma vez que os parâmetros envolvidos na combustão são influenciados pela transferência de calor, e, conseqüentemente, o projeto e a otimização de sistemas de combustão dependem dos modelos. Portanto, a eficiência energética de processos que envolvem combustão possui papel estratégico no panorama energético, justificando o interesse crescente no estudo, na aplicação, e na modelagem dos diversos fenômenos envolvidos no processo de combustão, entre eles, a transferência de calor por radiação, a qual constitui a área de estudo da presente pesquisa.

Destaca-se ainda a abordagem complexa que será utilizada no presente estudo, uma vez que a análise numérica será realizada empregando modelagens acopladas para os diversos mecanismos de transporte que existem em uma chama turbulenta, tais como combustão, radiação, e turbulência. Cada um desses assuntos ainda é objeto de pesquisa intensa, os quais são temas complexos mesmo quando abordados isoladamente, sendo inviável a tentativa de se avançar simultaneamente em todos eles. Assim, o principal objetivo do presente trabalho é a análise numérica da radiação térmica em uma chama turbulenta, a qual já constitui por si só um problema bastante complexo de ser modelado numericamente, devido a sua natureza não-linear e forte dependência espectral.

1.2 Revisão bibliográfica

A modelagem de processos de combustão pode assumir muitas formas, não sendo viável atualmente a representação, em todo o seu detalhamento, dos principais fenômenos envolvidos (escoamento, convecção e turbulência, reações químicas e radiação térmica) de maneira conjunta.

Algumas abordagens modelam com mais detalhes determinado fenômeno, enquanto desprezam ou modelam de forma grosseira outros. Existem abordagens que fazem um enfoque mais detalhado na modelagem da cinética química envolvida no processo de combustão, empregando mecanismos de cinética química detalhados com centenas de reações químicas, mas ignoram, ou resolvem de forma muito simplificada, o escoamento, a turbulência, a convecção de calor e a radiação térmica. Outras resolvem detalhadamente o escoamento, a turbulência e a convecção, empregando, por exemplo, metodologias de cálculo que resolvem as flutuações turbulentas, com razoável atenção à cinética química do processo de combustão, e não resolvem a transferência de calor por radiação. Outros modelos apresentam pouco, ou nenhum, detalhamento para a solução do escoamento e da cinética química, mas focam na radiação térmica presente no processo de combustão, empregando modelos de propriedades espectrais bastante detalhados.

A seguir são apresentados alguns dos principais trabalhos relacionados à modelagem da radiação térmica em processos de combustão encontrados na literatura. No decorrer do texto, outras citações relevantes serão feitas à medida que os métodos utilizados no trabalho forem descritos, tais como a modelagem espectral do coeficiente de absorção e a modelagem das interações TRI.

Robinson, 1985, apresentou a solução de um processo de combustão no interior de uma fornalha retangular vertical de uma grande caldeira de uma planta de geração de energia elétrica. Foi descrito um conjunto de equações para representar o problema, tais como as equações de conservação de massa, de quantidade de movimento em três direções, de energia, de espécies químicas, de energia cinética turbulenta e de sua dissipação. Estas equações foram resolvidas pelo método de volumes finitos, e ainda foram incluídos modelos das reações químicas e de transferência de calor por radiação. O modelo de combustão utilizado foi fundamentado no conceito de reação química em uma única etapa global entre combustível e oxidante, e para calcular as taxas das reações químicas Robinson, 1985, utilizou o modelo E-A (do inglês: *Eddy Break-Up* - Arrhenius), o qual se baseia na lei de Arrhenius e nos

modelos de dissipação de vórtices de Magnussen. A transferência de calor devido à radiação foi tratada através do Método de Fluxo, o qual assume que a equação de transferência radiativa seja reduzida a uma forma unidimensional, sendo então aplicada nas três dimensões em estudo. Os resultados obtidos com as simulações foram comparados com dados experimentais de duas grandes fornalhas obtendo boa concordância.

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

Em outro trabalho, Magel et al., 1996a, investigaram numericamente o processo de combustão de gás natural em uma câmara de combustão considerando coordenadas cilíndricas axissimétricas, com um único queimador situado na linha de simetria da câmara. Como resultado de suas investigações, os autores apresentaram perfis de temperatura, de concentrações de oxigênio, de monóxido de carbono e de dióxido de carbono para várias posições de interesse no interior da câmara de combustão. Seus resultados foram comparados com dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994.

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

Gran e Magnussen, 1996, desenvolveram um estudo numérico sobre processos reativos com chama difusiva estabilizada, verificando a capacidade de solução de modelos de combustão baseados em taxas finitas de reações químicas e também com reações químicas

instantâneas. Três modelos de combustão foram investigados e comparados, o EDC, o β -PDF (do inglês: *Probability Density Function*), e o PDF-*transport*. Eles concluíram que quando se assumiram reações químicas instantâneas, o método PDF-*transport* fornecia melhores resultados para a temperatura e para as frações mássicas do que os modelos EDC e β -PDF, enquanto quando taxas finitas de reações químicas foram assumidas, os resultados do modelo EDC concordaram melhor com os dados experimentais.

Pember et al., 1996, desenvolveram um estudo numérico do processo de combustão sem pré-mistura em uma câmara cilíndrica vertical para baixos números de Mach, assumindo axissimetria, e que o combustível (metano) e o ar eram injetados por um queimador de 300 kW situado sobre a linha de simetria da câmara. As reações químicas de combustão foram consideradas em duas etapas e foram resolvidas equações de conservação de massa, de quantidade de movimento axial e radial, com turbilhonamento (*swirl*), além das equações de conservação de energia e de espécies químicas. A turbulência foi resolvida com o modelo k - ϵ padrão, o modelo E-A foi usado para determinar as taxas de reações químicas, sendo a taxa limite utilizada, e a transferência de calor por radiação foi resolvida através do método de ordenadas discretas. Os resultados obtidos tiveram boa concordância com dados experimentais.

Gomes et al., 1997, simularam processos de combustão de gás natural em fornalhas industriais cilíndricas utilizando o software Ansys Fluent. Na modelagem apresentada naquele trabalho foram incluídos, além das equações de conservação de massa, de energia, de espécies químicas e de quantidade de movimento, os modelos de turbulência k - ϵ , de reações químicas E-A, e de transferência de calor por radiação DTRM (do inglês: *Discrete Transfer Radiation Model*), sendo ainda empregado o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG – do inglês: *weighted-sum-of-gray-gases*) para a determinação do coeficiente de absorção do meio participante. Os resultados obtidos neste trabalho apresentaram boa concordância com os resultados experimentais de Garréton e Simonin, 1994.

Nieckele et al., 2001, realizaram uma análise numérica envolvendo processos de combustão em uma câmara cilíndrica, usando o software Ansys Fluent, para a qual dados experimentais foram avaliados. A radiação térmica foi resolvida com o DTRM acoplado ao modelo WSGG, e o mecanismo de reação de metano foi considerado em dois passos. Neste trabalho foi apresentado um estudo comparativo entre diferentes modelos de combustão, comparando os resultados obtidos com dados experimentais apresentados em Garréton e

Simonin, 1994. Dentre os modelos de combustão utilizados estão o modelo E-A e o modelo β -PDF. Foi mostrado que o modelo de combustão que mais se aproximou dos dados experimentais foi o modelo E-A, obtendo excelente concordância com os resultados experimentais.

Miroslav et al., 2001, realizaram uma investigação numérica e experimental de um processo de combustão turbulenta de metano e ar em um jato livre, na qual ar e combustível, em proporções estequiométricas, eram injetados por um orifício cilíndrico central, e ar puro era injetado por um duto anular externo a este orifício. O modelo de turbulência adotado baseava-se no RSM (do inglês: *Reynolds Stress Model*), o qual leva em consideração o cálculo de equações das tensões turbulentas e da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. Considerou-se reação química em uma única etapa global, com taxas obtidas pelo modelo E-A. Os resultados obtidos com a simulação numérica apresentaram boa concordância com dados experimentais.

Um estudo numérico de processos de combustão em chamas turbulentas de metano sem pré-mistura foi apresentado em Fairweather e Woolley, 2004, no qual foi utilizado o modelo CMC (do inglês: *Conditional Moment Closure*) de primeira ordem, para modelagem da combustão. As soluções numéricas foram obtidas com o método de volumes finitos. Foram usados dois modelos de turbulência, o k - ϵ padrão e o RSM. As reações químicas foram resolvidas com o uso de dois mecanismos de cinética química: o GRI-Mech 2.11, composto por duzentas e setenta e nove reações e quarenta e nove espécies, e o GRI-Mech 3.0, composto por trezentas e vinte e cinco reações e cinquenta e três espécies químicas. Foram realizadas diversas simulações variando alguns parâmetros, tais como vazão e concentração de combustível, sendo os resultados comparados com dados experimentais, obtendo boa concordância para todas as situações, com exceção da predição das frações molares de NO_x, que não apresentaram boa concordância para alguns casos. Com relação à comparação entre os modelos de turbulência utilizados, ambos os modelos apresentaram bons resultados, havendo pouca diferença entre eles.

Yang e Blasiak, 2005, realizaram uma investigação numérica sobre a influência da temperatura de entrada do combustível durante o processo de combustão em um jato de propano pré-aquecido e ar, sem pré-mistura, em uma fornalha retangular. A modelagem foi baseada nas equações médias de Navier Stokes, juntamente com as equações médias de conservação de energia e de espécies químicas, empregando dois modelos de combustão, EBU (do inglês: *Eddy Break-Up*) e β -PDF, com o objetivo de comparar seus resultados. O

modelo de turbulência adotado foi o $k-\epsilon$ RNG (do inglês: *Renormalization Group*). Os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais obtendo uma melhor concordância para o modelo EBU, principalmente com relação às magnitudes de temperaturas e formato da chama.

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

A formação e o transporte de fuligem em uma chama turbulenta de etileno e ar sem pré-mistura foi estudada em Lignell et al., 2007, empregando simulação numérica direta (DNS – do inglês: *Direct Numerical Simulation*) em geometria bidimensional com mecanismo de reação do etileno descrito em quinze passos e da fuligem em quatro passos, sendo necessárias 32500 horas para simular 5 ms do fenômeno físico (325000 passos de tempo). O domínio físico possuía 2 cm \times 3 cm e foi discretizado em 960000 volumes. Este tipo de estudo é fundamental para mostrar aspectos fenomenológicos da combustão, apesar de ser restrito para geometrias simples e pequenas devido à sua alta complexidade, e consequente alto custo computacional, impedindo, atualmente, sua aplicação em simulações de processos em escala real ou mesmo em escala laboratorial.

Silva et al., 2007, realizaram a simulação numérica da combustão de metano em ar em uma câmara cilíndrica, empregando o método de 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 modelo $k-\epsilon$, e a radiação térmica foi resolvida pelo método das zonas, sendo que o comportamento espectral do meio foi modelado com o WSGG. Os resultados indicaram que o maior efeito da radiação térmica foi percebido nos fluxos de calor nas paredes da câmara,

onde se observou que as trocas de calor por radiação foram mais importantes que as por convecção. As trocas radiativas 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. Por outro lado, os efeitos da radiação térmica nas reações químicas não foram significativos.

Borjini et al., 2007, simularam a transferência de calor radiativa em uma caldeira industrial com geometria tridimensional contendo misturas homogêneas e não-homogêneas de CO₂, H₂O e fuligem, assim como campos de temperatura isotérmicos e não-isotérmicos, sendo o coeficiente de absorção dos gases modelado pelo modelo WSGG e a fuligem foi tratada pelo modelo GC. Os resultados mostraram que a consideração da fuligem aumentou consideravelmente a transferência de calor por radiação na caldeira.

Bidi et al., 2008, estudaram numericamente a combustão turbulenta de metano e ar pré-misturados em uma câmara cilíndrica considerando o efeito da radiação térmica através do modelo WSGG e do método de ordenadas discretas para solução da ETR, assim como modelaram a turbulência pelo modelo $k-\varepsilon$ padrão, consideraram um mecanismo de reação de três passos e calcularam as taxas das reações pelo modelo E-A. Os resultados indicaram que a radiação térmica pode afetar a temperatura e a concentração de espécies em escoamentos reativos turbulentos, sendo que os resultados numéricos obtidos considerando efeito da radiação ficaram mais próximos dos dados experimentais do que no caso em que tal efeito foi negligenciado.

Uma chama difusiva laminar de etileno e ar foi investigada numérica e experimentalmente por Saji et al., 2008, utilizando um mecanismo de reação de dezessete passos e considerando o efeito da fuligem sobre a radiação térmica, para a qual o coeficiente de absorção da mistura gasosa e fuligem foi considerado pelo modelo GC. Os autores resolveram as equações de Navier-Stokes em coordenadas cilíndricas axissimétricas, juntamente com as equações de conservação de energia, espécies gasosas e fuligem, utilizando o método de volumes finitos. Os resultados apresentaram concordância razoável entre os dados numéricos e os experimentais ao comparar a altura da chama e a distribuição de temperatura.

Maurente et al., 2008, apresentaram o cálculo da transferência de calor radiativa em uma cavidade cilíndrica na qual as dimensões, os campos prescritos de concentrações de espécies químicas e de temperatura foram representados de forma adequada a uma câmara de

combustão real, sendo estudados e comparados os resultados provenientes da aplicação de dois modelos espectrais de gases: o modelo da função distribuição ALB (do inglês: *Absorption-Line Blackbody distribution function*), e o modelo WSGG padrão baseado em coeficientes e correlações amplamente utilizadas em engenharia. Os autores consideraram estes dois modelos para poderem comparar os efeitos da não-homogeneidade do meio participante sobre a transferência de calor radiativa, uma vez que a obtenção dos coeficientes do modelo WSGG padrão baseia-se na hipótese de mistura homogênea de gases, enquanto o modelo da função distribuição ALB não possui tal restrição. Os resultados mostraram a importância de considerar a não-homogeneidade do meio participante para um cálculo confiável da transferência de calor radiativa.

O estudo da estrutura de chamas laminares em contra-corrente e chamas turbulentas em escoamento paralelo de etileno e ar, com o objetivo de analisar o enfraquecimento e a extinção das chamas devido ao aumento da intensidade de radiação nas regiões de alta concentração de fuligem, foi realizado em Narayanan e Trouvé, 2009, utilizando DNS, com cinética química de um único passo e solução da ETR com o DTRM e modelagem do coeficiente de absorção da mistura pelo modelo GC.

Venuturumilli e Chen, 2009, estudaram os efeitos de dois mecanismos de reação de metano (um mecanismo reduzido de quatro passos, e seu mecanismo inicial de sessenta e cinco passos) sobre a estrutura de chama, velocidade de chama, e taxas de reação das principais espécies em uma chama laminar difusiva em escala laboratorial em geometria cilíndrica axissimétrica, sendo os principais resultados muito próximos para os dois mecanismos, e o tempo computacional do mecanismo inicial quatro vezes maior do que para o mecanismo reduzido.

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

Paul et al., 2010, investigaram o escoamento turbulento reativo de propano e ar em

uma câmara cilíndrica aplicando LES, utilizando a aproximação de escalar conservado com o modelo de *flamelets* laminares para modelagem do processo de combustão. Os valores de fração mássica das espécies, temperatura e massa específica, os quais são funções da fração de mistura (escalar conservado), foram determinados por integração de uma função densidade de probabilidade tipo beta (β -PDF). Os resultados apresentaram previsões de temperatura e fração de mistura em concordância muito boa com os dados experimentais.

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

A modelagem clássica da turbulência, aplicada no trabalho de Saqr et al., 2010, tem sido amplamente empregada em trabalhos que envolvem a modelagem completa de processos de combustão, assim, alguns trabalhos descritos no texto acima, ou adiante, utilizaram esta metodologia para tratar o fenômeno da turbulência. Contudo, por motivos de brevidade e para não tornar a leitura repetitiva, nem todos os trabalhos citados apresentam esta descrição de forma explícita, porém deve-se salientar que todos os trabalhos citados em que a investigação numérica foi realizada resolvendo equações de escoamento turbulento juntamente com equações de combustão, e que não estão descritos como trabalhos que utilizaram metodologias DNS ou LES, são trabalhos que empregaram a modelagem RANS.

Silva et al., 2010 utilizaram o software Ansys CFX para estudar a combustão de carvão em uma caldeira de uma usina termelétrica com o objetivo de simular as condições operacionais e identificar fatores de ineficiência. O comportamento do escoamento de ar e carvão pulverizado através dos queimadores foi analisado, e o escoamento dos gases de combustão através da câmara de combustão e trocadores de calor foi reproduzido na simulação numérica, a qual levou em consideração a transferência de calor radiativa, sendo a ETR resolvida com o DTRM, o coeficiente de absorção foi considerado pelo modelo GC e o

espalhamento foi considerado isotrópico.

Um código de volumes finitos foi utilizado em Mossi et al., 2010a, para simular uma chama laminar difusiva de metano e ar, sendo resolvidas equações para conservação de massa, de quantidade de movimento, de espécies químicas, e de energia, considerando cinética química detalhada e incluindo formação de fuligem. A radiação térmica foi calculada resolvendo a ETR com o método de ordenadas discretas, modelando o coeficiente de absorção com o modelo GC e com o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza baseado em linhas espectrais (SLW – do inglês: *Spectral Line-based Weighted-sum-of-gray-gases*). O objetivo do trabalho era comparar os resultados para as distribuições de temperatura, concentração de espécies gasosas, e fuligem, obtidos com os dois modelos do coeficiente de absorção, além de discutir sobre o custo computacional das simulações, o qual foi praticamente duplicado quando o modelo SLW foi utilizado.

Cálculos da transferência de calor radiativa da chama Sandia D [Barlow e Frank, 1998] foram executados em Krishnamoorthy, 2010a, empregando medições experimentais de temperatura e concentrações dos gases e o método de ordenadas discretas, sendo as interações turbulência-radiação (TRI – do inglês: *Turbulence-Radiation Interactions*) consideradas empregando medições da variância das flutuações de temperatura para cálculo da autocorrelação de temperatura. Como os autores observaram que a razão entre as concentrações de H₂O e de CO₂ dentro da chama variavam bastante e estavam algumas vezes fora da faixa de ajuste de parâmetros dos modelos WSGG reportados na literatura, eles determinaram novos parâmetros para o modelo WSGG, sendo que desta maneira as previsões com o novo modelo WSGG se compararam favoravelmente em relação aos resultados do modelo SLW, o qual foi utilizado para comparação.

Em uma investigação posterior, Krishnamoorthy, 2010b, realizou cálculos da transferência de calor radiativa em poças de incêndio de tolueno e heptano de 30 cm de diâmetro, empregando também o método de ordenadas discretas, assim como considerando os efeitos da autocorrelação da temperatura nas interações TRI. Neste estudo, Krishnamoorthy, 2010b, utilizou dados experimentais de fração volumétrica de fuligem, temperatura (e sua variância) e concentrações de gases, com o objetivo de comparar diferentes modelagens espectrais dos gases, tais como modelo GC, modelo WSGG, modelo SLW e modelo EWBM (do inglês: *Exponential-Wide-Band Model*), incluindo ainda a radiação da fuligem considerando coeficiente de absorção independente da variável espectral.

Outra aplicação do modelo WSGG foi realizada em Guedri et al., 2011, onde os

autores utilizaram o software FDS (do inglês: *Fire Dynamics Simulator*) para simular uma situação de incêndio em um depósito com prateleiras feitas de papelão corrugado empregando a metodologia LES. As simulações mostraram que os resultados referentes à altura de chama, temperatura, e velocidade dos gases são fortemente influenciados pela radiação térmica, e os perfis obtidos nas simulações ficaram mais próximos dos resultados experimentais quando o modelo de radiação com fuligem e gases não-cinza foi incorporado nos cálculos.

Modelos de propriedades radiativas, GC, SNBCK (do inglês: *Statistical Narrow Band Correlated-k*), WSGG, FSCK (do inglês: *Full-Spectrum Correlated-k*), e SLW, foram avaliados em Demarco et al., 2011, comparando com soluções de referência obtidas com o modelo SNB (do inglês: *Statistical Narrow Band*) em configurações unidimensionais (meio homogêneo e isotérmico e meio não-homogêneo e não-isotérmico) e bidimensional axissimétrica (meio homogêneo não-isotérmico), contendo misturas de vapor de água, dióxido de carbono e fuligem. Os resultados mostraram que o modelo WSGG forneceu melhores resultados que o modelo GC, conduzindo a discrepâncias somente para altas concentrações de fuligem, o modelo SNBCK foi recomendado para soluções que necessitem de alto grau de precisão, mas exigiu elevado tempo computacional, enquanto os modelos FSCK e SLW foram os que forneceram, em geral, o melhor balanço entre precisão dos resultados e exigência computacional.

Em Becher et al., 2012, foram testados diversos modelos espectrais de gases, tais como modelos de banda larga e banda estreita, modelo SLW, e diversos modelos WSGG existentes na literatura, por comparação à soluções linha-por-linha obtidas com a base dados espectrais HITEMP 2010. As comparações foram feitas para situações de combustão em ar e em oxigênio puro, com espessuras ópticas de 0,001 m à 100 m, e temperaturas entre 800 °C e 1800 °C, sendo os cálculos de emitância total realizados no software MATLAB. Os autores encontraram que o modelo WSGG proposto por Johansson et al., 2011, é o mais versátil para ser aplicado em simulações computacionalmente eficientes, sendo então o modelo recomendado para uso em simulações CFD (do inglês: *Computational Fluid Dynamics*).

Chu et al., 2012, calcularam a transferência de calor radiativa em uma cavidade retangular bidimensional contendo misturas de CO₂-H₂O-N₂, usando o método linha-por-linha com a base de dados espectrais HITEMP 2010 e o modelo SNBCK. Os cálculos foram realizados para casos envolvendo misturas isotérmicas e não-isotérmicas, homogêneas e não-homogêneas de CO₂-N₂, H₂O-N₂, e CO₂-H₂O-N₂. Os resultados mostraram boa concordância do modelo SNBCK com a solução linha-por-linha para todos os casos.

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

Os modelos GC e WSGG foram aplicados para as propriedades radiativas da fase gasosa e tiveram seus resultados comparados na investigação numérica [Crnomarkovic et al., 2013] de uma fornalha de queima tangencial de carvão pulverizado, utilizando o método das zonas para solução da transferência de calor radiativa. Os resultados mostraram diferenças nos campos de temperatura de aproximadamente 1,0% e nos fluxos de calor nas paredes de 5,0% no máximo, justificando a aplicabilidade do modelo GC para a simulação deste tipo de fornalha.

Bulat et al., 2014, estudaram a formação de NO e CO na câmara de combustão de uma turbina a gás industrial usando LES e um método PDF, com mecanismo de reação de combustão de quinze etapas. A radiação térmica foi considerada através da hipótese de meio participante opticamente fino.

Uma fornalha em escala laboratorial foi investigada em Prieler et al., 2014, com o objetivo de analisar diferentes modelos de combustão. Os modelos estudados foram o *steady flamelet laminar*, EDM, e EDC. A modelagem das propriedades espectrais dos gases foi considerada com o modelo WSGG, e a ETR foi resolvida com o método de ordenadas discretas.

1.3 Contribuição do trabalho

O presente trabalho, de caráter numérico-computacional, tem como objetivo principal estimar o papel da transferência de calor radiativa em uma chama turbulenta resultante da combustão de metano em ar em uma câmara cilíndrica, levando-se em consideração a transferência radiativa das espécies gasosas e da fuligem, assim como os efeitos das interações TRI.

O fenômeno conhecido por combustão resulta de reações químicas envolvidas em uma série de interações entre advecção e difusão, as quais são descritas por equações de

conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas. Cada uma dessas equações é altamente complexa, podendo-se citar como exemplo a equação de conservação de quantidade de movimento, para a qual muitas vezes é necessário resolver o fenômeno da turbulência, ou a equação de conservação de energia, onde se deve calcular a transferência de calor por radiação, ou ainda a equação de conservação de espécies químicas, a qual necessita do cálculo das taxas das reações, sendo que todos esses fenômenos são acoplados.

Em relação à equação de conservação de energia, a literatura não está completamente clara a respeito dos efeitos causados pela radiação térmica no processo de combustão. Os gases e as partículas sólidas geradas durante a queima do combustível têm a capacidade de absorver, emitir e, algumas vezes, espalhar a radiação térmica. Assim, gases polares, como o vapor de água e o dióxido de carbono, apenas absorvem e emitem radiação, enquanto o meio particulado, o qual pode ser composto por fuligem e cinza em suspensão, também espalha radiação térmica, quando possuir cinza.

Como a radiação térmica pode ser o modo dominante de transferência de calor em uma chama, torna-se imprescindível a modelagem correta do termo fonte de calor radiativo para a obtenção de resultados mais próximos da realidade e, assim, para o entendimento correto dos fenômenos. Contudo, calcular o termo fonte de calor radiativo em todo o seu detalhamento é uma tarefa muito complexa e praticamente impossível em análises acopladas do fenômeno de combustão, devido à forte dependência espectral, além das dependências espacial (relacionada à não-homogeneidade dos campos de temperatura e de concentrações de espécies gasosas e fuligem) e direcional (relacionada ao ângulo sólido), portanto sua modelagem é necessária para a solução do problema em um tempo viável. Tais condições são reconhecidamente as que impõem as maiores dificuldades para os modelos de radiação.

A solução completa do processo de transferência de calor na combustão de hidrocarbonetos é uma tarefa que depende de várias áreas do conhecimento, incluindo cinética química, transporte turbulento e transferência radiativa. Cada um desses assuntos é atualmente objeto de pesquisa intensa, sendo ainda inviável a tentativa de se avançar simultaneamente em todos eles.

Primeiramente, os modelos estudados (WSGG e GC) serão resolvidos de forma acoplada ao problema de combustão, incluindo então a solução das equações de conservação em coordenadas cilíndricas axissimétricas em regime permanente e na formulação para baixos números de Mach (massa, quantidade de movimento, energia, espécies químicas, etc.), além

da equação de transferência radiativa e das interações TRI. Os diferentes resultados serão confrontados para que se faça uma análise do impacto que a modelagem da radiação térmica causa no campo de temperaturas e na formação das espécies resultantes do processo de combustão, assim como em variáveis radiativas importantes, como a taxa líquida de transferência radiativa, fração radiativa (razão entre a taxa líquida de transferência radiativa e a taxa de calor liberada na combustão), e fluxo de calor radiativo nas paredes da câmara de combustão.

No presente trabalho é utilizada a modelagem clássica da turbulência (RANS), uma vez que esta é considerada atraente dos pontos de vista de exigência computacional e concordância dos resultados numéricos globais (temperaturas médias e concentrações médias das principais espécies químicas) com os dados experimentais. Outro motivo para esta escolha está relacionado ao principal objetivo do presente trabalho, que é a análise da radiação térmica em uma chama turbulenta, a qual já constitui por si só um problema bastante complexo de ser modelado numericamente, devido a sua natureza não-linear e forte dependência espectral.

A modelagem do coeficiente de absorção do meio participante será feita com os modelos WSGG e GC nos cálculos acoplados radiação-CFD. A escolha do modelo WSGG se deve à boa precisão dos resultados que este vem apresentando em simulações unidimensionais com misturas de gases (H_2O e CO_2) e fuligem, em proporções tipicamente encontradas em chamas de metano-ar [Dorigon et al., 2013; Becher et al., 2012; Demarco et al., 2011; Cassol, 2013], em comparação a outros modelos (SLW, CW, etc.), além do seu custo computacional ser compatível com aplicações acopladas à solução das equações de conservação. Considerando o baixo custo computacional imposto pelo emprego do modelo GC, este é muito importante em algumas aplicações reais de engenharia, como em simulações de grandes caldeiras industriais, ou em estudos das interações TRI empregando LES ou DNS, os quais mesmo isolados apresentam demanda computacional elevada; por este motivo, o modelo GC também será avaliado neste trabalho.

Outro objetivo importante da presente pesquisa será comparar resultados *benchmark* obtidos pelo modelo linha-por-linha (LBL - do inglês: *line-by-line*), considerado o modelo de maior precisão para determinação do coeficiente de absorção do meio participante, com resultados obtidos pelos modelos WSGG e GC, obtendo assim estimativas dos desvios esperados quando estes modelos forem aplicados para solução da radiação térmica na simulação de problemas de combustão.

O modelo de propriedades espectrais LBL possui demanda computacional elevada,

aproximadamente 4000 vezes mais elevada do que os modelos WSGG e GC, sendo inviável por ora a sua implementação acoplada em simulações radiação-CFD. Contudo, esta abordagem serve como *benchmark* para avaliação de modelos globais.

Assim, em um segundo momento realiza-se a avaliação dos modelos WSGG e GC, os quais serão comparados com soluções LBL, em problemas com geometria cilíndrica axissimétrica, considerando campos prescritos de temperatura não-isotérmicos e campos de concentrações de espécies gasosas e fuligem não-homogêneos. Os campos de temperatura e de concentrações serão obtidos previamente a partir de simulações numéricas envolvendo a combustão de metano em uma câmara cilíndrica, ou seja, nesta parte do trabalho as simulações não considerarão o acoplamento entre radiação e CFD. Sabe-se que as distribuições de temperatura e concentração dos gases e fuligem possuem gradientes muito elevados, situações que são comuns em problemas de combustão. Com estes resultados, será possível a avaliação quantitativa dos desvios esperados quando os modelos WSGG e GC forem empregados em problemas com geometria cilíndrica axissimétrica para chamas turbulentas. Do conhecimento do autor, não existem estudos na literatura em que a avaliação dos modelos WSGG e GC em geometria cilíndrica axissimétrica em um chama turbulenta tenha sido realizada.

A linguagem de programação utilizada nas soluções dos problemas propostos no presente trabalho é Fortran 90. Em contraste aos softwares comerciais, o emprego deste tipo de recurso possui como vantagens a possibilidade de realizar quaisquer implementações que sejam necessárias à pesquisa, tais como consideração da influência da não-homogeneidade do meio participante sobre o campo de radiação, consideração dos efeitos das interações TRI em simulações RANS, emprego de qualquer modelo de propriedades radiativas, como o LBL ou o WSGG (incluindo formulações atualizadas e diferenciadas).

A presente pesquisa corresponde a um assunto de grande interesse científico, inserida no estado-da-arte em transferência de calor radiativa em chamas turbulentas com presença de fuligem, considerando o processo de combustão de hidrocarbonetos, um assunto de grande interesse no país e inserido dentro da estratégia energética de conversão de energia de combustíveis fósseis e não-fósseis.

1.4 Organização do texto

O Capítulo 2 apresenta as equações governantes para o processo de combustão

turbulenta, sendo apresentadas equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas gasosas e fuligem. Ainda, é apresentado o modelo de turbulência utilizado (modelo $k-\varepsilon$ padrão), assim como o equacionamento dos modelos de combustão (modelo E-A) e de formação de fuligem que serão utilizados. As equações governantes do processo de transferência de calor radiativa estão discutidas no Capítulo 3, onde são apresentados os conceitos de corpo negro, intensidade de radiação, meios participantes, e finalmente a equação de transferência radiativa, a qual é utilizada no cálculo do termo fonte de calor radiativo que aparece na equação da conservação de energia. Ainda no Capítulo 3, são apresentados os modelos espectrais do coeficiente de absorção que serão utilizados na presente pesquisa (linha-por-linha, WSGG e GC), a modelagem da radiação devido à fuligem, e das interações turbulência-radiação. O Capítulo 4 apresenta os métodos numéricos utilizados na solução das equações apresentadas nos Capítulos 2 e 3, sendo eles o método de volumes finitos e o método de ordenadas discretas. Para verificação e validação da modelagem adotada, o Capítulo 5 apresenta (i) o problema em estudo, incluindo condições de contorno e propriedades termofísicas, (ii) estudo de convergência de malha, (iii) verificação do balanço de energia na câmara de combustão, (iv) influência de variações nas condições turbulentas de entrada, (v) verificação da importância das forças de empuxo, e (vi) comparação de resultados obtidos no presente trabalho com resultados da literatura. O Capítulo 6 apresenta os resultados obtidos na presente pesquisa, os quais estão relacionados com a transferência de calor radiativa na câmara da combustão quando (i) a modelagem do coeficiente de absorção dos gases participantes é feita utilizando diferentes modelos WSGG e GC, quando (ii) são consideradas as interações turbulência-radiação, e quando (iii) a contribuição da fuligem para a transferência de calor por radiação é considerada. Ainda, o Capítulo 6 apresenta a avaliação dos modelos WSGG e GC em geometria cilíndrica axissimétrica comparando seus resultados com soluções *benchmark* LBL. O Capítulo 7 traz as conclusões e as sugestões de trabalhos futuros.

2 EQUAÇÕES GOVERNANTES DO PROCESSO DE COMBUSTÃO TURBULENTO DE GASES

Nas últimas décadas modelos físico-matemáticos têm sido usados para simular numericamente os mais variados processos físicos. Com a disponibilidade de computadores com melhor capacidade de processamento, problemas nos quais a solução numérica não era viável, mesmo em geometrias e condições simplificadas, são atualmente resolvidos em condições muito próximas da situação real.

Os primeiros modelos para a descrição da transferência de quantidade de movimento e de energia (ou de outra propriedade) em escoamentos turbulentos basearam-se essencialmente na identificação de grandezas adimensionais para a caracterização do escoamento. Os modelos assim desenvolvidos relacionam, por exemplo, quantidades como o número de Nusselt (Nu) em função do número de Reynolds (Re) e o número de Prandtl (Pr). Embora úteis em algumas situações, essas correlações geralmente são limitadas à geometria do problema e às faixas de Re e de Pr para as quais elas foram ajustadas [Bejan, 2004; Kays e Crawford, 1993].

Desde o surgimento e com a popularização dos computadores, análises mais elaboradas tornaram-se possíveis através da aplicação de técnicas numéricas para a solução das equações diferenciais governantes. As três principais metodologias para a solução numérica dos escoamentos turbulentos são a simulação numérica direta (DNS), a simulação de grandes escalas (LES) e a modelagem clássica da turbulência (RANS) [Wilcox, 2006; Saugat, 2006; Lesieur et al., 2005].

Simulação Numérica Direta

Na simulação numérica direta (DNS) da turbulência as equações de conservação (massa, quantidade de movimento, energia e concentrações de espécies químicas) são resolvidas em todas as escalas do escoamento. Se a discretização espacial do domínio for suficientemente fina, todos os fenômenos físicos serão resolvidos [Silva Freire et al., 2002].

Além da discretização espacial bastante refinada, deve-se ainda levar em conta outros aspectos importantes na DNS: necessidade de utilizar pequenos incrementos de tempo devido ao comportamento dos vórtices de pequenas escalas, necessidade de utilizar um tempo de integração numérica muito maior do que a escala de tempo das maiores escalas para se obter

boa convergência das estatísticas da turbulência, e ainda necessidade de utilizar esquemas numéricos com boa precisão, tanto para a discretização espacial quanto para a discretização temporal [Lesieur et al., 2005].

Segundo Coelho, 2012, a alta exigência computacional para a realização da DNS das equações de transporte torna esta metodologia proibitiva para aplicações práticas atualmente, mas viáveis para configurações simples e números de Reynolds relativamente baixos. Além disso, Coelho, 2012, destaca que a DNS está limitada preferencialmente para problemas artificiais e restrita para meios opticamente finos e, devido às suas restrições relacionadas ao tamanho da malha, as dimensões devem ser relativamente pequenas.

Apesar das limitações, a DNS fornece dados fundamentais e confiáveis sobre a física do problema, e, na área de escoamentos turbulentos reativos, tem sido utilizada, por exemplo, em estudos relacionados às interações turbulência-radiação [Wu et al., 2005; Yoo et al., 2005; Deshmukh et al., 2008], e em estudos referentes à formação, crescimento e transporte de fuligem [Bisetti et al., 2012; Narayanan e Trouvé, 2009; Lignell et al., 2007, 2008; Yoo e Im, 2007].

Simulação de Grandes Escalas

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

A simulação de grandes escalas está se tornando popular e a sua aplicação para problemas mais complexos está ficando acessível devido aos contínuos avanços na capacidade dos computadores. Apesar das exigências computacionais serem muito maiores em LES do que na metodologia média clássica (RANS), espera-se que a precisão também seja muito melhor, uma vez que as grandes escalas do escoamento são calculadas explicitamente, e somente os efeitos das escalas sub-malha precisam ser modelados [Coelho, 2012].

Entre os estudos recentes que utilizaram a metodologia LES em escoamentos reativos, destacam-se aqueles relacionados às interações turbulência-radiação [Gupta et al., 2013;

Poitou et al., 2012; Roger et al., 2010, 2011], aos efeitos fuligem/radiação [Mueller e Pitsch, 2012], e às interações entre a turbulência e a estrutura da chama, considerando [Poitou et al., 2011; Paul e Paul, 2010; Zhang et al., 2009; Santos et al., 2008; Ihme e Pitsch, 2008] ou não [Auzillon et al., 2011; Wu et al., 2011] os efeitos da radiação térmica.

Modelagem Clássica da Turbulência

Embora informações sobre as menores escalas do escoamento sejam relevantes, em muitas situações é suficiente, ou mesmo necessário, uma descrição do escoamento médio.

A modelagem clássica da turbulência baseia-se na ideia de se realizar uma média temporal sobre as equações de conservação que modelam os escoamentos. O conceito de *Tensão de Reynolds*, introduzido por Reynolds, 1895, usa esta ideia e é o ponto de partida para a maioria das simulações de escoamentos. De acordo com este método, qualquer quantidade do escoamento (velocidade, temperatura, pressão e concentrações de espécies) pode ser expressa através de uma quantidade média e outra flutuante associada à turbulência [Wilcox, 2006].

Existem dois tipos de procedimentos comumente empregados na determinação de médias temporais: média de Reynolds e média ponderada pela massa, também chamada de média de Favre [Kuo, 2005].

A aplicação de médias temporais nas equações de transporte de propriedades instantâneas do escoamento leva a termos adicionais nas equações devido às parcelas flutuantes de tais propriedades, sendo estes termos denominados *Tensões de Reynolds*. Contudo, o número de equações de conservação permanece o mesmo, e devido a estes termos adicionais surge o problema do fechamento.

Com o objetivo de solucionar o problema do fechamento surgiram os modelos de turbulência, que consistem em introduzir novas equações para a modelagem dos termos adicionais nas equações de conservação da quantidade de movimento, de energia, e de espécies químicas.

A hipótese de que as *Tensões de Reynolds* são proporcionais à deformação no escoamento médio, agindo de forma análoga às tensões viscosas, foi originalmente proposta por Boussinesq, 1877, através do conceito de viscosidade turbulenta. Considerando um escoamento unidirecional ao longo de uma placa plana infinita, ele propôs que, assim como no caso da tensão viscosa, a tensão de Reynolds, ou seja, a contribuição da turbulência na

transferência de quantidade de movimento poderia ser modelada por

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

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

Ao longo dos últimos anos, os modelos de turbulência fundamentados no conceito de viscosidade turbulenta baseada na hipótese de Boussinesq, em uma forma generalizada proposta por Kolmogorov, 1942, tem sido os métodos mais empregados para a previsão de escoamentos turbulentos [Silva Freire et al., 2002]. O transporte turbulento de calor, massa, ou qualquer outra propriedade escalar pode ser modelado de forma similar [Versteeg e Malalasekera, 2007; Launder e Spalding, 1972].

A modelagem clássica da turbulência tem sido extensivamente aplicada na simulação de escoamentos turbulentos reativos.

Kassem et al., 2011, analisaram uma câmara de combustão em escala laboratorial empregando formulação em médias de Favre, com o objetivo de implementar e testar um modelo de interação entre turbulência e cinética química em um software aberto de simulação de dinâmica de fluidos computacional (OpenFOAM), validando os resultados obtidos (perfis de temperatura) com dados experimentais. O estudo de Kassem et al., 2011, não considerou a transferência de calor por radiação, a qual também foi desprezada no estudo de Amani e Nobari, 2010, que analisaram um método PDF para simulação de chamas turbulentas sem pré-mistura, usando como base uma chama laboratorial (denominada “chama Sandia D”), empregando também o equacionamento em médias de Favre.

A aplicação da modelagem clássica da turbulência juntamente com cálculos de transferência de calor por radiação geralmente é feita utilizando um dos seguintes modelos de propriedades radiativas dos gases: gás cinza (GC) ou soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG).

Neste contexto, exemplos de aplicações do modelo GC são descritos a seguir. Em

Vascellari e Cau, 2012, os autores apresentaram a simulação de uma câmara de combustão industrial de queima de carvão pulverizado, testando alguns modelos de interação entre turbulência e cinética química. Zhao et al., 2011, investigaram incêndios em tubulações de gás natural. No trabalho de Cuoci et al., 2007, foram estudados três modelos de interação entre turbulência e cinética química em uma chama em escala de laboratório. Outro exemplo é a análise de uma fornalha industrial apresentada em Stefanidis et al., 2006, em que foram investigados os efeitos de dois modelos de combustão e de dois mecanismos de reação de combustão (um global de três reações, e um detalhado com trinta e cinco reações) sobre as predições obtidas.

No que diz respeito à utilização da modelagem clássica da turbulência incluindo transferência de calor radiativa com o modelo WSGG, podem-se citar como exemplo os trabalhos de Parente et al., 2008, que simularam uma chama em escala de laboratório para testar dois modelos de interação entre turbulência e cinética química com dois mecanismos de reação (global e detalhado), Habibi et al., 2007a, 2007b, que estudaram os efeitos de diferentes correlações das interações TRI em predições de chamas em escala de laboratório, e Christo e Dally, 2005, em que os autores investigaram três variações do modelo de fechamento da turbulência $k-\varepsilon$, e ainda dois modelos de combustão, para os quais foram aplicados dois mecanismos de reação de combustão diferentes (um global de três reações, e um detalhado com trinta e três reações) em uma chama de laboratório.

O presente trabalho emprega a modelagem clássica da turbulência, pois, conforme discutido na Seção 1.3, esta metodologia apresenta boa relação custo computacional *versus* concordância de resultados numéricos com dados experimentais, sendo então apropriada ao principal objetivo do presente trabalho, que constitui a análise da radiação térmica em uma chama turbulenta.

A aproximação para baixos números de Mach é empregada no presente trabalho, sendo que na sua formulação a massa específica pode variar devido às variações de temperatura, mas permanece independente da pressão. Esta formulação é muito boa para escoamentos com baixas velocidades, tipicamente encontrados em combustão subsônica [Poinsot e Veynante, 2005]. Assim, o escoamento é considerado incompressível, mas a massa específica é diferente ao longo da chama, devido à variação na temperatura.

O restante deste capítulo apresenta as equações governantes em regime permanente, incompressível, em coordenadas cilíndricas axissimétricas para o processo de combustão turbulenta, sendo apresentadas equações de conservação de massa, de quantidade de

movimento, de energia e de espécies químicas, para as quais é assumida a hipótese de Boussinesq para a viscosidade turbulenta e aplica-se o modelo $k-\varepsilon$ para calculá-la. Além disso, este capítulo traz o equacionamento dos modelos de combustão e de formação de fuligem que serão utilizados. A dedução destas equações, incluindo as *Tensões de Reynolds*, pode ser encontrada em vários livros textos [Wilcox, 2006; Silva Freire et al., 2002; Versteeg e Malalasekera, 2007; Schlichting, 1979; Hinze, 1975; Launder e Spalding, 1972].

As equações governantes do processo de transferência de calor radiativa serão discutidas posteriormente no Cap. 3, devido à importância da radiação térmica no contexto do presente trabalho.

2.1 Equação da conservação de massa

A equação da conservação de massa em regime permanente, incompressível, em coordenadas cilíndricas axissimétricas para escoamentos turbulentos é descrita por:

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

onde $\bar{\rho}$ é a massa específica temporal média da mistura gasosa, \bar{u} e \bar{v} são as componentes da velocidade temporal média nas direções axial e radial z e r , respectivamente. Observa-se que o termo fonte de massa, correspondente à correlação das flutuações de massa específica e velocidade, decorrente da realização da média de Reynolds, está sendo desprezado [Poinsot e Veynante, 2005].

2.2 Equações da conservação de quantidade de movimento

As equações da conservação de quantidade de movimento nas direções axial, radial e angular, em regime permanente, incompressível, em coordenadas cilíndricas axissimétricas, são descritas, respectivamente, por:

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial z}(\bar{\rho}\bar{u}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r}(\bar{\rho}\bar{u}) = & -\frac{\partial p^*}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r\mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{v}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \bar{v}) = & -\frac{\partial p^*}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) - \frac{(\mu + \mu_t) \bar{v}}{r^2} + \frac{\bar{\rho} \bar{w}^2}{r} \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} r \bar{w}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} r \bar{w}) = & \frac{\partial}{\partial z} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial (r \bar{w})}{\partial z} \right) \\ & + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r(\mu + \mu_t) \frac{\partial (r \bar{w})}{\partial r} \right) - \frac{2(\mu + \mu_t)}{r} \frac{\partial (r \bar{w})}{\partial r} \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica da mistura gasosa, μ_t é a viscosidade turbulenta. O termo $p^* = \bar{p} - (2/3)k$ é a pressão modificada (onde a parcela $(2/3)k$ é devida à forma generalizada do tensor de Reynolds introduzida por Kolmogorov, 1942), C_μ é uma constante empírica do modelo de turbulência, \bar{p} é a pressão temporal média da mistura gasosa, k e ε são a energia cinética turbulenta e sua dissipação. Uma vez que o escoamento de ar e combustível é considerado na direção axial na entrada da câmara em estudo no presente trabalho, ou seja, sem a presença de *swirl*, a Eq. (2.5) não precisa ser resolvida, porém ela está sendo apresentada com o objetivo de deixar o equacionamento completo.

2.3 Turbulência: modelagem e funções de parede

A viscosidade turbulenta pode ser obtida através de (i) modelos algébricos, os quais são baseados na hipótese do comprimento de mistura introduzido por Prandtl, 1925, (ii) modelos de uma equação, nos quais a viscosidade turbulenta depende da energia cinética das flutuações turbulentas, k , postulado por Prandtl, 1945, (iii) modelos de duas equações, introduzidos inicialmente por Kolmogorov, 1942, os quais, além da equação de transporte da energia cinética turbulenta, k , resolvida nos modelos de uma equação, introduzem o cálculo de uma equação de transporte adicional para o parâmetro ω , referido então como taxa de dissipação de energia por unidade de volume e de tempo, sendo a viscosidade turbulenta calculada em função dos dois parâmetros, k e ω além de outras constantes do modelo, e ainda (iv) modelos de fechamento de segunda ordem, ou modelos de transporte de tensões, propostos primeiramente por Chou, 1945, e Rotta, 1951, os quais não utilizam a hipótese de Boussinesq [Wilcox, 2006].

2.3.1 Modelo $k-\varepsilon$

Um dos modelos de turbulência mais conhecidos e usados atualmente, adotado no presente trabalho, é o modelo $k-\varepsilon$, proposto inicialmente por Launder e Spalding, 1972, que, assim como o modelo $k-\omega$, também utiliza duas equações de conservação para determinar a viscosidade turbulenta.

Apesar de suas limitações, tais como em aplicações em escoamentos parietais, regiões com recirculação ou separação de camadas limites [Fluent, 2009; Silva Freire et al., 2002], o modelo $k-\varepsilon$ tem sido empregado em simulações de combustão em câmaras de combustão cilíndricas, provendo bons resultados conforme apresentado na revisão bibliográfica descrita no Cap. 1 deste trabalho.

Este modelo utiliza uma equação de conservação para a energia cinética turbulenta k , e outra para a sua dissipação, ε , as quais, em regime permanente e em coordenadas cilíndricas axissimétricas, são dadas por,

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} k) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} k) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial r} \right) + P_k - \bar{\rho} \varepsilon \quad (2.6)$$

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \varepsilon) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right) + C_{1,\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{2,\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.7)$$

onde o termo de produção ou dissipação de energia cinética turbulenta pode ser definido como:

$$P_k = \mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \quad (2.8)$$

A viscosidade turbulenta é definida como:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.9)$$

Os valores das constantes do modelo são [Launder e Spalding, 1972; Launder e

Sharma, 1974; Cotton e Jackson, 1990; Davidson, 1990; Xia et al., 1998]:

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

2.3.2 Funções de parede

Os vórtices próximos às paredes sólidas possuem diminutas escalas de comprimento, e assim frequências altas. Dessa forma a turbulência nestas regiões pode ser considerada estatisticamente independente dos vórtices de baixa frequência (grandes escalas de comprimento) e do escoamento médio. Assim, assume-se que o escoamento junto à parede é afetado somente pela proximidade da parede e pela viscosidade do fluido. Tal região é denominada *região de parede* e pode ser subdividida em três regiões [Silva Freire et al., 2002]:

- *Subcamada limite viscosa*: transporte devido à difusão molecular é dominante.
- *Camada de amortecimento*: transportes molecular e turbulento são da mesma ordem de magnitude.
- *Região turbulenta*: transporte turbulento é dominante.

Como consequência deste comportamento, considera-se um perfil linear de velocidades na região próxima da parede, e um perfil logarítmico é aplicado na região de escoamento turbulento, assim [Patankar, 1980],

$$\begin{aligned} y^+ \leq 11,5 &\rightarrow u^+ = y^+ \\ y^+ > 11,5 &\rightarrow u^+ = \frac{1}{\Lambda} \ln(y^+) + \Psi \end{aligned} \quad (2.10)$$

onde $y^+ = y(\rho C_\mu^{1/4} k^{1/2} \mu^{-1})$ é a dimensão característica adimensional, $u^+ = \bar{u}/u^*$ é a velocidade característica adimensional, $u^* = \sqrt{\tau_w/\rho}$ é a velocidade de fricção, em que τ_w é a tensão cisalhante na parede, e y é a distância a partir da parede. De acordo com dados experimentais reportados por Nikuradse, 1933, pode-se associar à constante de proporcionalidade Λ o valor de 0,4, e para a constante de ajuste Ψ o valor de 5,5.

Em um problema com escoamento não-isotérmico funções de parede também são necessárias para determinar o fluxo de calor por difusão das regiões próximas à parede para a

mesma [Patankar, 1980]. Sendo assim, segundo dados experimentais, para $y^+ \leq 11,5$ a transferência de calor para a parede é governada por fenômenos moleculares, sendo função apenas das propriedades do fluido em consideração. Deste modo,

$$\Gamma_T = \left(\frac{\mu}{Pr} \right) \quad (2.11)$$

onde Γ_T é o coeficiente de difusividade térmica utilizado na equação da conservação de energia e Pr é o número de Prandtl ($Pr = c_p \mu / k$). Para $y^+ > 11,5$ os efeitos da turbulência estão presentes e a difusão de calor tem sua intensidade aumentada. Sendo assim, a seguinte função de parede deve ser usada [Patankar, 1980]:

$$\Gamma_T = \frac{\mu y^+}{Pr_t \left\{ 2,5 \ln(9y^+) + \left[9 \left(\frac{Pr}{Pr_t} - 1 \right) \left(\frac{Pr}{Pr_t} \right)^{-1/4} \right] \right\}} \quad (2.12)$$

onde Pr_t é o número de Prandtl turbulento.

2.4 Equação da conservação da massa das espécies químicas

A equação da conservação da massa das espécies químicas é resolvida para todas as espécies, menos para o nitrogênio, que se mantém inerte durante as reações químicas. Em regime permanente, incompressível, em coordenadas cilíndricas axissimétricas, esta equação é descrita por:

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{y}_\alpha) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \bar{y}_\alpha) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{y}_\alpha}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{y}_\alpha}{\partial r} \right) + \bar{R}_\alpha \quad (2.13)$$

onde \bar{y}_α é a fração mássica temporal média da espécie α , Sc é o número de Schmidt ($Sc = \nu / D$), Sc_t é o número de Schmidt turbulento, e \bar{R}_α é a taxa volumétrica de formação ou consumo da espécie α , a qual é calculada como o somatório de todas as taxas volumétricas de

formação ou consumo em todas as reações k onde a espécie α está presente, $\overline{R_{\alpha,k}}$, ou seja,

$$\overline{R_{\alpha}} = \sum_k \overline{R_{\alpha,k}} \quad (2.14)$$

Esta taxa de formação ou consumo, $\overline{R_{\alpha,k}}$, pode ser obtida por uma expressão de cinética química de Arrhenius, ou por expressões que consideram que as taxas de reações químicas sejam controladas pela mistura turbulenta, tais como as equações de Magnussen [Magnussen e Hjertager, 1977], ou ainda, de forma conjunta, pelas duas expressões [Nieckele et al., 2001; Eaton et al., 1999; Fluent, 2009; Silva et al., 2007].

Modelo de Arrhenius

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

$$\overline{R_{\alpha,k}} = -\eta_{\alpha,k} \overline{MM_{\alpha}} \overline{T}^{\beta_k} A_k e^{(-E_k/\overline{RT})} \prod_{\alpha, \text{reagentes}} \overline{c_{\alpha}}^{\gamma_{\alpha,k}} \quad (2.15)$$

onde $\eta_{\alpha,k}$ é o coeficiente estequiométrico da espécie α na reação k (valores positivos para reagentes e negativos para produtos), $\overline{MM_{\alpha}}$ é a massa molecular da espécie α , β_k é o expoente da temperatura para cada reação k , A_k é o fator pré-exponencial da reação k , E_k é a energia de ativação da reação k , \overline{R} é a constante universal dos gases perfeitos ($8,3145 \text{ kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$), $\overline{c_{\alpha}}$ é a concentração molar da espécie reagente α , $\gamma_{\alpha,k}$ é o expoente da concentração da espécie α na reação k . Posteriormente, no Cap. 5, será apresentado o mecanismo de reação de combustão que será utilizado no presente trabalho, e conseqüentemente serão também apresentados os valores de todos os parâmetros necessários para o cálculo de $\overline{R_{\alpha,k}}$ utilizados na Eq. (2.15).

Modelo Eddy Break-Up

No modelo *Eddy Break-Up*, também chamado de modelo de Magnussen [Spalding, 1971, 1977; Magnussen e Hjertager, 1977], as taxas de reações químicas entre as espécies estão basicamente fundamentadas em teorias de dissipação de vórtices onde a turbulência está presente. Assim, neste modelo as taxas de reações químicas são relacionadas com as taxas de dissipação dos vórtices turbulentos que contém produtos e reagentes. Assume-se que a taxa de dissipação dos vórtices turbulentos seja proporcional à razão entre a dissipação da energia cinética turbulenta e a energia cinética turbulenta, ε/k . Neste modelo, a taxa de reação $\overline{R_{\alpha,k}}$ é determinada pela Eq. (2.16) ou pela Eq. (2.17),

$$\overline{R_{\alpha,k}} = -\eta_{\alpha,k} \overline{MM}_{\alpha} K_1 \rho \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{\overline{y_{\alpha^*}}}{\eta_{\alpha^*,k} \overline{MM}_{\alpha^*}} \right) \quad (2.16)$$

$$\overline{R_{\alpha,k}} = \eta_{\alpha,k} \overline{MM}_{\alpha} K_1 K_2 \rho \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{\sum_p \overline{y_p}}{\sum_p \eta_{p,k} \overline{MM}_p} \right) \quad (2.17)$$

onde o índice α^* representa a espécie reagente α que fornece o menor valor para $\overline{R_{\alpha,k}}$, K_1 e K_2 são constantes empíricas prescritas como 4,0 e 0,5, ε/k é a escala de tempo para a turbulência obtida do modelo $k-\varepsilon$, p representa as espécies químicas formadas como produtos da combustão, $\eta_{p,k}$ é o coeficiente estequiométrico da espécie química p do produto da reação k , \overline{MM}_p é a massa molecular dos produtos e $\overline{y_p}$ é a fração mássica dos produtos. Estas duas equações são geralmente aplicáveis para processos de combustão sem pré-mistura ou com pré-mistura, e também combustão de jatos e partículas. Assim, as Equações (2.16) e (2.17) são resolvidas, sendo então assumido o menor valor encontrado para $\overline{R_{\alpha,k}}$.

Modelo Eddy Break-Up - Arrhenius

Para o modelo combinado de *Eddy Break-Up* - Arrhenius, ou modelo E-A, o valor

final da taxa de formação ou consumo das espécies químicas, que deve ser empregado no cálculo do termo fonte das equações de conservação de energia e de espécies químicas, deve ser o menor valor obtido no cálculo da equação de Arrhenius (Eq. (2.15)) e das equações de Magnussen (Eqs. (2.16) e (2.17)). Modelos deste tipo são capazes de resolver uma grande faixa de aplicações, incluindo sistemas de combustão com ou sem pré-mistura [Eaton et al., 1999]. Este modelo é capaz de fornecer bons resultados quando comparados com dados experimentais, podendo-se citar inúmeros exemplos de sua aplicação [Bidi et al., 2008; Silva et al., 2007; Ilbas, 2005; Nieckele et al., 2001; Miroslav et al., 2001].

2.4.1 Formação e oxidação de fuligem

A formação de partículas de carbono, ou fuligem, é um fenômeno frequentemente observado na combustão de hidrocarbonetos. A formação de fuligem envolve processos químicos e físicos fortemente acoplados. Em termos dos processos fundamentais, a formação de fuligem pode ser vista como consistindo em três subprocessos principais: nucleação das partículas de fuligem, coagulação e aglomeração das partículas, reações superficiais nas partículas (crescimento e oxidação) [Law, 2006; Haynes e Wagner, 1981]. A modelagem da formação/oxidação de fuligem constitui um dos problemas mais complexos em combustão, sendo ainda um campo de pesquisa em desenvolvimento.

No presente trabalho, o modelo empregado no cálculo do campo de fuligem é o modelo de Khan e Greeves, 1974, em conjunto com o modelo de Magnussen e Hjertager, 1977, permitindo assim a determinação das taxas de formação e oxidação da fuligem. O principal objetivo de calcular tal campo está relacionado com as análises que poderão ser realizadas sobre a contribuição da fuligem para a transferência de calor radiativa no interior da câmara de combustão. Além deste modelo, existem outros modelos de fuligem apresentados na literatura, porém não são diretamente aplicáveis ao caso em estudo por diferentes razões.

O modelo de formação de fuligem de Tesner et al., 1971, o qual considera a solução de uma equação de transporte para a fração mássica de fuligem e outra para a concentração de núcleos de radicais também é usualmente acoplado ao modelo de oxidação de fuligem de Magnussen e Hjertager, 1977, porém o modelo de Tesner et al., 1971, tem sido empregado na literatura com ajustes nos seus coeficientes para as diferentes chamas, com o objetivo de aproximar as suas predições aos dados experimentais [Fluent, 2009; Okuyama et al., 2004;

Cheung et al., 2004; Haynes e Wagner, 1981; Magnussen e Hjertager, 1977], impossibilitando a sua aplicação no presente trabalho uma vez que a câmara de combustão em estudo não possui medições experimentais de fuligem, tornando inviável o ajuste de tais coeficientes.

O modelo de formação de fuligem de Brookes e Moss, 1999a, calcula as mesmas equações de transporte que o modelo de Tesner et al., 1971, porém para o cálculo das taxas de reação este modelo utiliza, entre outros parâmetros, a concentração de acetileno, sendo então inviável aplicar este modelo no presente trabalho uma vez que o mecanismo de reação de dois passos adotado no presente trabalho não considera esta espécie química.

Outros modelos, como o de Köylü e Faeth, 1991, o qual fornece uma correlação para a fração mássica de fuligem em função da fração mássica de CO, e o modelo de Yao et al., 2011, para o qual deve-se calcular uma equação de transporte para a fração mássica de fuligem e determinar a sua taxa de formação [Beji et al., 2008] e oxidação [Leung et al., 1991] a partir de modelos que são funções da área superficial da fuligem, da fração mássica da fuligem, da fração de mistura local, da temperatura, da fração mássica de combustível, e da concentração molar de oxigênio, apresentam algumas particularidades que os tornam não diretamente aplicáveis na presente pesquisa, seja devido ao tipo de chama para a qual eles foram ajustados, seja pela metodologia de cálculo das taxas de reação que deve ser empregada.

Desta maneira o modelo de Khan e Greeves, 1974, mostrou-se uma alternativa viável para ser empregada no presente trabalho, pois os seus coeficientes têm sido aplicados sem modificações [Fluent, 2009; Saario et al., 2005; Snegirev, 2004; Coelho e Carvalho, 1995] e, além disso, ele pode ser acoplado ao modelo de oxidação de Magnussen e Hjertager, 1977, o qual é aplicado no presente trabalho também para o cálculo das taxas de reação dos gases.

Os modelos de formação de Khan e Greeves, 1974, e de oxidação de Magnussen e Hjertager, 1977, compõem a modelagem de fuligem padrão no software Fluent, e suas constantes são válidas para uma ampla faixa de combustíveis hidrocarbonetos [Fluent, 2009].

Barreiros, 2001, aplicou esta modelagem no seu estudo sobre interações turbulência-radiação em chamas difusivas turbulentas altamente radiativas.

Como parte do seu estudo sobre uma fornalha laboratorial, Saario et al., 2005, empregaram esta modelagem para prever o campo de fuligem na fornalha, e então investigar a influência da fuligem sobre o seu comportamento térmico.

Coelho e Carvalho, 1995, a aplicaram para estudar formação e oxidação de fuligem em chamas difusivas turbulentas de propano-ar, comparando-o com outros modelos de

formação e oxidação de fuligem, e concluíram que esta modelagem, apesar da sua relativa simplicidade, fornece bons resultados. A Fig. 2.1 reproduz alguns resultados de Coelho e Carvalho, 1995, em que os resultados do modelo de Khan e Greeves, 1974, são comparados com resultados de modelos mais detalhados, podendo-se observar que a principal diferença entre os resultados ocorre na região próxima à saída de combustível (100 mm e 200 mm), região esta com concentrações de fuligem relativamente baixas, enquanto mais à jusante do bico injetor (300 mm e 400 mm) as previsões de ambos os modelos apresentam melhor concordância entre si e com os dados experimentais para aquela chama.

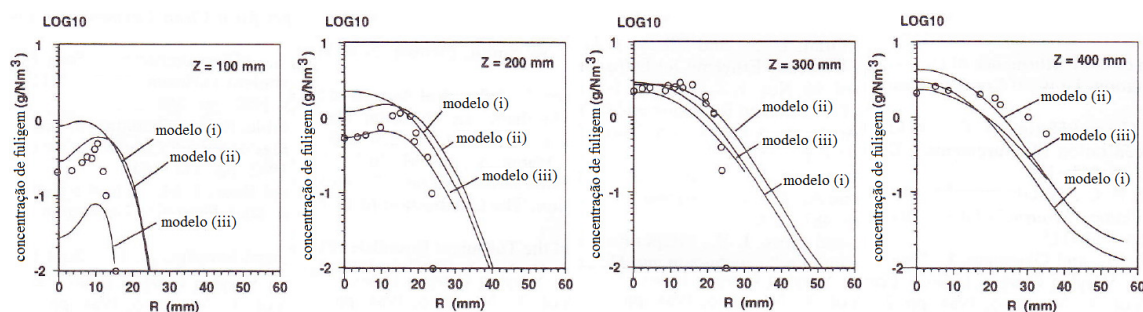


Figura 2.1 - Medições (símbolos) e previsões (linhas sólidas) de perfis de concentrações de fuligem para diferentes modelos de formação de fuligem: (i) Khan e Greeves, 1974, (ii) Stewart et al., 1991, e (iii) Fairweather et al., 1992 (adaptado de Coelho e Carvalho, 1995).

Assim, para a obtenção do campo de fuligem, a seguinte equação de transporte para a fração mássica de fuligem, em regime permanente em coordenadas cilíndricas axissimétricas, é resolvida:

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{y}_s) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \bar{y}_s) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{y}_s}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{y}_s}{\partial r} \right) + \bar{R}_s \quad (2.18)$$

onde \bar{y}_s é a fração mássica de fuligem temporal média, e \bar{R}_s [$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$] é a taxa volumétrica líquida de formação ou oxidação de fuligem, a qual é determinada pelo balanço entre as taxas de formação de fuligem, $\bar{R}_{s,form}$, e de oxidação de fuligem, $\bar{R}_{s,oxid}$:

$$\overline{R_s} = \overline{R_{s,form}} - \overline{R_{s,oxid}} \quad (2.19)$$

A taxa de formação de fuligem é dada por [Khan e Greeves, 1974]:

$$\overline{R_{s,form}} = C_s p_{comb} \phi^r e^{-E/RT} \quad (2.20)$$

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

Assume-se que a oxidação da fuligem seja governada pela taxa de Magnussen [Magnussen e Hjertager, 1977]. A oxidação da fuligem pode ser limitada ou pela concentração de fuligem ou pela concentração de oxigênio, sendo assim a taxa de oxidação efetiva é o menor valor entre duas expressões,

$$\overline{R_{s,oxid}} = \min[\overline{R_1}, \overline{R_2}] \quad (2.21)$$

As duas taxas $\overline{R_1}$ e $\overline{R_2}$ são calculadas como

$$\overline{R_1} = K_1 \overline{\rho} \overline{y_s} \frac{\mathcal{E}}{k} \quad (2.22)$$

e

$$\overline{R_2} = K_1 \overline{\rho} \left(\frac{\overline{y_{ox}}}{\overline{\eta_s}} \right) \left(\frac{\overline{y_s \eta_s}}{\overline{y_s \eta_s + y_{comb} \eta_{comb}}} \right) \frac{\mathcal{E}}{k} \quad (2.23)$$

onde $\overline{y_{ox}}$ e $\overline{y_{comb}}$ são as frações mássicas temporais médias de oxidante e de combustível, η_s e η_{comb} são coeficientes do modelo, sendo seus valores iguais a 2,6667 e 3,6363, respectivamente [Fluent, 2009].

2.5 Equação da conservação de energia

Para escoamentos reativos em regime turbulento, a equação da conservação de energia em termos de entalpia, em regime permanente, incompressível, assumindo número de Lewis unitário, em coordenadas cilíndricas axissimétricas, tem a forma:

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{h}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \bar{h}) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\frac{k}{c_p} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \bar{h}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\frac{k}{c_p} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \bar{h}}{\partial r} \right) + \bar{S}^h \quad (2.24)$$

onde a entalpia total temporal média da mistura \bar{h} é definida pelo somatório das entalpias médias temporais de cada espécie, de acordo com a seguinte equação:

$$\bar{h} = \sum_{\alpha} \bar{y}_{\alpha} \bar{h}_{\alpha} \quad (2.25)$$

Na Eq. (2.25) a entalpia de cada espécie α é dada por,

$$\bar{h}_{\alpha} = h_{\alpha}^0 + \int_{T_{ref}}^{\bar{T}} c_{p,\alpha} dT \quad (2.26)$$

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

Ainda, o termo c_p representa o calor específico a pressão constante da mistura, obtido pela relação:

$$c_p = \sum_{\alpha} \bar{y}_{\alpha} c_{p,\alpha} \quad (2.27)$$

O termo fonte \bar{S}^h na Eq. (2.24) é composto pelos termos $\overline{S_{rad}}$ e $\overline{S_{rea}}$. O termo fonte de calor radiativo, $\overline{S_{rad}}$, calculado como $\overline{S_{rad}} = -\nabla \cdot \vec{q}_{rad}$, constitui o principal objeto de estudo do presente trabalho, e será discutido em detalhes nos Capítulos 3 e 4. O termo fonte $\overline{S_{rea}}$ representa o somatório dos termos fontes devido às reações químicas, e pode ser definido

da seguinte forma [Fluent, 2009; Silva et al., 2007; Nieckele et al., 2001],

$$\overline{S_{rea}} = \sum_{\alpha} \left[h_{\alpha}^0 + \int_{T_{ref}}^T c_{p,\alpha} dT \right] \overline{R_{\alpha}} \quad (2.28)$$

onde $\overline{R_{\alpha}}$ é a taxa volumétrica de formação ou consumo da espécie α obtida com o modelo de combustão (modelo E-A, descrito na Seção 2.4), e devem ser consideradas todas as espécies químicas (reagentes e produtos) que fazem parte das reações de combustão.

Para completar a modelagem matemática, considerando a aproximação para baixos números de Mach, determina-se a massa específica média da mistura através da equação de estado de gás perfeito [Fluent, 2009; Spalding, 1979]:

$$\overline{\rho} = \frac{p_0 \overline{MM}}{R\overline{T}} \quad (2.29)$$

onde p_0 é a pressão atmosférica (pressão de operação da câmara), e \overline{MM} é a massa molecular que varia de acordo com a concentração da mistura, e é calculada da seguinte forma:

$$\overline{MM} = \left(\sum_{\alpha} \frac{\overline{y_{\alpha}}}{\overline{MM}_{\alpha}} \right)^{-1} \quad (2.30)$$

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

3 RADIAÇÃO TÉRMICA

O estudo do processo de transferência de calor por radiação térmica em meios participantes (onde gases e/ou partículas sólidas absorvem, emitem e espalham radiação), tem recebido crescente atenção nos últimos anos devido à sua importante aplicação em fornalhas, câmaras de combustão em elevadas temperaturas e pressões, fabricação de vidro, explosões nucleares, transferência de calor em meios porosos, entre outros. Embora algumas dessas aplicações sejam relativamente recentes, o estudo da radiação em gases vem sendo explorado por mais de cem anos.

Um dos primeiros estudos sobre radiação térmica foi relacionado com a interferência da energia vinda do Sol e que é absorvida e espalhada na atmosfera terrestre. 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, temperatura, e concentração.

A combustão de hidrocarbonetos gera produtos como o vapor d'água e o dióxido de carbono, que são importantes na emissão e na absorção da energia radiativa. A energia nas chamas não é proveniente somente de gases, mas também da fuligem (partículas de carbono quente) e de material particulado em suspensão, como é o caso na combustão de carvão pulverizado. Em câmaras de combustão a temperatura pode atingir a ordem de 10^3 K, o que torna o processo de transferência de calor por radiação térmica tão importante quanto os demais mecanismos de transferência de calor [Siegel e Howell, 2002].

Neste capítulo objetiva-se apresentar a equação de transferência radiativa (ETR), a qual descreve como a radiação térmica é transportada dentro de um meio participante. Para isso, inicialmente definem-se o corpo negro e a intensidade de radiação, os quais são convenientes para o estudo da transferência de calor por radiação tanto em meios não participantes, quanto nos participantes, em seguida descreve-se o comportamento espectral dos gases participantes no processo de transferência radiativa, assim como a modelagem deste comportamento, logo após a modelagem do comportamento radiativo da fuligem é apresentada, e finalmente aborda-se o assunto de interações turbulência-radiação, assim como a modelagem adotada no presente trabalho para estas interações. Maiores detalhes sobre estes assuntos podem ser encontrados em Siegel e Howell, 2002, Modest, 2003 e Coelho, 2007.

3.1 Corpo negro

Como um absorvedor e um emissor perfeito, o corpo negro é uma idealização que serve de padrão para definir propriedades radiativas de superfícies reais. O corpo negro possui as seguintes propriedades:

- Absorve toda a energia radiativa incidente, independente do comprimento de onda e da direção.
- Nenhuma superfície emite mais energia do que um corpo negro, para certa temperatura e número de onda.
- A radiação emitida por um corpo negro não depende da direção, ou seja, o corpo negro é um emissor difuso.

A intensidade de radiação espectral do corpo negro em dadas condições de temperatura e número de onda é descrita pela distribuição espectral de Planck, mostrada na Eq. (3.1),

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

onde $h = 6,6256 \times 10^{-34}$ J·s e $k = 1,3805 \times 10^{-23}$ J·K⁻¹ são as constantes universais de Planck e Boltzmann, respectivamente, $c_0 = 2,9979 \times 10^8$ m·s⁻¹ é a velocidade da luz no vácuo, T é a temperatura, e η é o número de onda.

Uma vez que o corpo negro é um emissor difuso, o poder emissivo espectral do corpo negro é dado por,

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

sendo $E_{\eta,CN}(\eta,T)$ o poder emissivo espectral do corpo negro, em W·m⁻²·cm, e $I_{\eta,CN}(\eta,T)$ a intensidade espectral do corpo negro, em W·m⁻²·cm·sr⁻¹.

Da integração da Eq. (3.2) em todos os números de onda, resulta a relação conhecida como lei de Stefan-Boltzmann,

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

onde $\sigma = 5,6704 \times 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$ é a constante de Stefan-Boltzmann. Este é o poder emissivo total do corpo negro, em $\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$, que representa o fluxo de energia radiativa emitido por uma superfície de área unitária à temperatura T . Ainda, através desta relação, pode-se obter a intensidade de radiação total associada à emissão do corpo negro, dada por

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

3.2 Intensidade de radiação

Segundo Siegel e Howell, 2002, a intensidade de radiação na direção (θ, φ) é definida como a energia que sai da superfície por unidade de tempo, por unidade de área projetada normal à direção (θ, φ) , e por unidade de ângulo sólido elementar centrado em torno da direção (θ, φ) . De acordo com esta definição, a intensidade emitida por um corpo negro não varia com a direção. Esta invariância é útil para comparação da intensidade direcional emitida por superfícies reais com aquela emitida por um corpo negro.

Inicialmente, considera-se a radiação que sai de uma fonte dA_s , e então percorre um meio ideal que não absorve, não emite, não espalha, e que possui propriedades radiativas constantes. Supõe-se então que um elemento de área imaginário dA_l está posicionado a uma distância S_l de dA_s e que dA_s e dA_l são normais a S_l , como mostrado na Fig. 3.1. A partir da definição de intensidade espectral $I_{\eta,1}$ como a taxa de energia que passa através de dA_l , por unidade de área projetada de dA_l , por unidade de ângulo sólido, e por unidade de intervalo de número de onda, a energia de dA_s passando através de dA_l na direção de S_l é

$$I_{\eta,1} dA_l d\omega_1 d\eta = I_{\eta,1} dA_l \left(dA_s / S_l^2 \right) d\eta \quad (3.5)$$

onde foi aplicada a relação de ângulo sólido $d\omega_1 = dA_s / S_l^2$. Supõe-se agora que dA_l esteja posicionada a uma distância S_2 da fonte ao longo da mesma direção original. A taxa de energia que passa por dA_l na nova posição é

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

Assim, das Equações (3.5) e (3.6) tem-se que a razão das taxas de energia para as distâncias S_1 e S_2 é

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

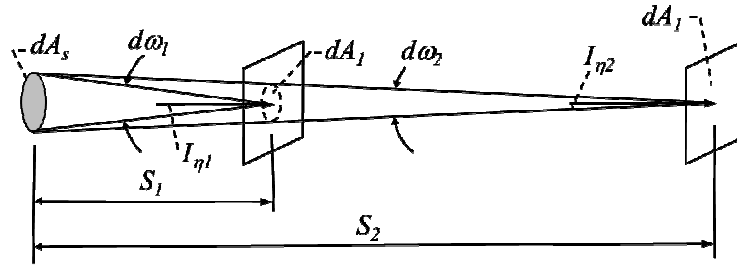


Figura 3.1 - Intensidade de radiação a partir de uma fonte em dA_s que incide em uma área dA_1 [Siegel e Howell, 2002].

Considera-se agora uma fonte diferencial emitindo energia igualmente para todas as direções, e então consideram-se duas esferas concêntricas ao redor desta fonte, como mostrado na Fig. 3.2. Se $dQ_{\eta,s}d\eta$ é a energia espectral hemisférica que deixa a fonte diferencial, o fluxo de energia que cruza a esfera interna é $dQ_{\eta,s}d\eta/4\pi S_1^2$, e aquele que cruza a esfera externa é $dQ_{\eta,s}d\eta/4\pi S_2^2$. A razão da energia que passa através do elemento de área dA_1 quando posicionado em S_1 e em S_2 sobre as esferas interna e externa, respectivamente, é então

$$\frac{(dQ_{\eta,s}d\eta/4\pi S_1^2)dA_1}{(dQ_{\eta,s}d\eta/4\pi S_2^2)dA_1} = \frac{S_2^2}{S_1^2} \quad (3.8)$$

Assim, das Equações (3.7) e (3.8) conclui-se que

$$I_{\eta,1} = I_{\eta,2} \quad (3.9)$$

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

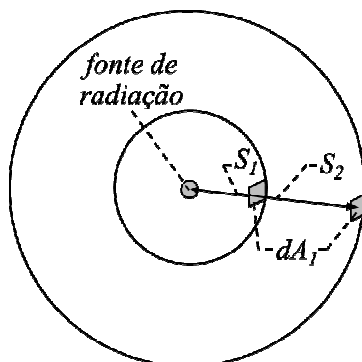


Figura 3.2 - Variação do fluxo de energia com a distância da fonte
(adaptado de Siegel e Howell, 2002).

A invariância da intensidade para meios que não participam do processo de transferência radiativa (meios transparentes) fornece uma forma conveniente para especificar a magnitude da atenuação (por absorção ou espalhamento) ou da emissão de intensidade de radiação para meios participantes, pois seus efeitos são diretamente mostrados pelas alterações de intensidade com a distância ao longo do meio.

3.3 Intensidade de radiação em meios participantes

Utiliza-se a equação de transferência radiativa (ETR) para obter a intensidade de radiação através de um meio participante. A ETR é uma equação diferencial que descreve a intensidade de radiação através de um meio que absorve, emite e espalha energia radiativa. Assim, a ETR considera os principais efeitos do meio participante sobre a intensidade de radiação, ou seja, a atenuação da intensidade devido à absorção e ao espalhamento, e o aumento da intensidade devido à emissão e devido ao espalhamento na direção do caminho da intensidade a partir de outras direções.

3.3.1 Atenuação da intensidade de radiação devido à absorção e ao espalhamento

Considere a radiação espectral de intensidade I_η incidente normal sobre um elemento de volume de espessura dS que absorve e espalha radiação, como mostrado na Fig. 3.3. Conforme a radiação passa através de dS , a sua intensidade é reduzida devido à absorção e ao espalhamento. Foi encontrado experimentalmente que a alteração na intensidade é dependente da magnitude da intensidade local, e que se um coeficiente de proporcionalidade K_η é introduzido, o qual depende das propriedades locais do meio, a redução é,

$$dI_\eta = -K_\eta(S)I_\eta dS \quad (3.10)$$

onde K_η é o coeficiente de extinção espectral do meio, em m^{-1} . Este coeficiente é uma propriedade física e é uma função da temperatura, pressão, composição do material (indicada aqui em termos das concentrações molares das espécies), e número de onda da radiação incidente, $K_\eta = K_\eta(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha)$. Integrando a Eq. (3.10) sobre um comprimento finito de caminho S resulta,

$$\int_{I_\eta(0)}^{I_\eta(S)} \frac{dI_\eta}{I_\eta} = -\int_0^S K_\eta(S^*) dS^* \quad (3.11)$$

onde $I_\eta(0)$ é a intensidade na origem do caminho, e S^* é uma variável usada para integração no caminho. O resultado da integração fornece,

$$I_\eta(S) = I_\eta(0) \exp \left[-\int_0^S K_\eta(S^*) dS^* \right] \quad (3.12)$$

A Eq. (3.12) denomina-se Lei de Bouguer. Esta equação mostra que, como uma consequência da proporcionalidade mostrada na Eq. (3.10), a intensidade da radiação espectral ao longo de um caminho é atenuada exponencialmente conforme ela passa através de um meio que absorve e espalha (não incluindo emissão local ou espalhamento na direção de S). O expoente é a integral do coeficiente de extinção local sobre o comprimento do caminho percorrido pela radiação.

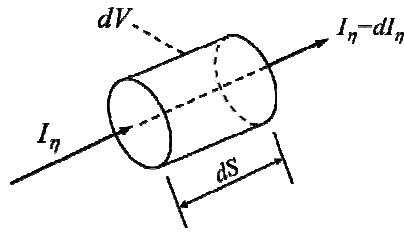


Figura 3.3 - Intensidade incidente normalmente sobre um elemento de volume de espessura dS que absorve e espalha [Siegel e Howell, 2002].

O coeficiente de extinção que aparece primeiramente na Eq. (3.10) consiste de duas partes, o coeficiente de absorção $\kappa_\eta(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha)$ e o coeficiente de espalhamento $\sigma_{s\eta}(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha)$:

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

Os coeficientes κ_η e $\sigma_{s\eta}$ possuem unidades de m^{-1} . Uma definição alternativa considera *coeficientes por unidade de massa específica*,

$$K_{\eta,m} = \kappa_{\eta,m} + \sigma_{s\eta,m} = \frac{K_\eta}{\rho} = \frac{\kappa_\eta}{\rho} + \frac{\sigma_{s\eta}}{\rho} \quad (3.14)$$

onde ρ é a massa específica das espécies participantes. Essa forma de representar esses coeficientes é mais conveniente, pois a partir de um mesmo $K_{\eta,m}$ pode-se calcular o coeficiente de extinção para diferentes massas específicas. Conforme apresentado em Smith et al., 1982, e em Modest, 2003, o coeficiente de extinção (e conseqüentemente os coeficientes de absorção e de espalhamento) pode ser escrito em função da pressão parcial das espécies participantes. Dessa forma tem-se,

$$K_{\eta,p} = \kappa_{\eta,p} + \sigma_{s\eta,p} = \frac{K_\eta}{p} = \frac{\kappa_\eta}{p} + \frac{\sigma_{s\eta}}{p} \quad (3.15)$$

na qual p é a pressão parcial do meio participante, e $K_{\eta,p}$, $\kappa_{\eta,p}$ e $\sigma_{s\eta,p}$ são os coeficientes de extinção, absorção e espalhamento por unidade de pressão.

Em meios em que o espalhamento pode ser negligenciado, ou seja, $\sigma_{s\eta} \approx 0$, então $K_{\eta} = \kappa_{\eta}$, e a Eq. (3.10) se torna,

$$dI_{\eta\alpha} = -\kappa_{\eta}(S)I_{\eta}dS \quad (3.16)$$

Se adicionalmente κ_{η} não é função da posição, como é a situação em um meio com propriedades uniformes, tal como em um gás bem misturado, então a Eq. (3.12) fica,

$$I_{\eta}(S) = I_{\eta}(0)\exp(-\kappa_{\eta}S) \quad (3.17)$$

O coeficiente de absorção $\kappa_{\eta}(\eta, T, p, \bar{c}_{\alpha})$ normalmente possui forte dependência espectral, além de variar também com a temperatura, pressão, e concentração. Sendo assim, o seu comportamento e sua modelagem serão discutidos na Seção 3.4 deste trabalho.

Segundo Siegel e Howell, 2002, a amplitude do espalhamento da radiação pode ser vista em termos de seções-transversais de espalhamento espectral, s_{η} , as quais dependem do tamanho e do formato da partícula, do número de onda, etc. A seção-transversal de espalhamento pode ser determinada experimentalmente através da medição da radiação em um feixe que penetra através de uma nuvem de partículas espalhadas, porém a dificuldade está em distinguir a radiação espalhada na direção principal, da radiação emitida. Para isso, pode-se utilizar um feixe incidente com um ângulo de divergência muito pequeno; a direção principal da radiação transmitida possui somente um pequeno ângulo sólido, então a radiação espalhada proveniente de outras direções será pequena. 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, dividida pela área da seção-transversal do feixe incidente dA ,

$$\frac{dI_{\eta s}}{I_{\eta}} = \frac{d^2A_{s\eta}}{dA} \quad (3.18)$$

A área efetiva de espalhamento para um grupo de partículas que espalham independentemente está relacionada às áreas de espalhamento das partículas individuais. Considere $dN(R)$ sendo o número de partículas por unidade de volume na faixa de raio entre R e $R+dR$, e considere $s_\eta(R)$ sendo a seção-transversal de espalhamento para uma partícula de raio R . Integrando sobre todas as partículas, a área de espalhamento efetiva em um volume diferencial dV (Fig. 3.5) de uma nuvem de partículas é

$$d^2A_{s\eta} = dV \int_{N(R)=0}^{\infty} s_\eta(R) dN(R) \quad (3.19)$$

A área efetiva de espalhamento por unidade de volume é definida como o coeficiente de espalhamento, $\sigma_{s\eta}$,

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

então $d^2A_{s\eta} = dV\sigma_{s\eta} = dAdS\sigma_{s\eta}$. Substituindo este resultado na Eq. (3.18) obtém-se a alteração na intensidade devido ao espalhamento do feixe incidente,

$$-\frac{dI_\eta}{I_\eta} = \frac{dI_{\eta S}}{I_\eta} = \frac{\sigma_{s\eta} dAdS}{dA} = \sigma_{s\eta}(S) dS \quad (3.21)$$

Existe também a intensidade espalhada a partir de todas as direções que então incide no caminho de S , contribuindo para o aumento da intensidade naquela posição. Este aumento será abordado na Seção 3.3.3.

Uma quantidade adimensional muito útil pode ser definida a partir do fator exponencial que aparece na Eq. (3.12),

$$\tau_\eta(S) = \int_0^S K_\eta(S^*) dS^* \quad (3.22)$$

de tal forma que a Eq. (3.12) torna-se

$$I_\eta(S) = I_\eta(0)e^{-\tau_\eta(S)} \quad (3.23)$$

onde $\tau_\eta(S)$ é a espessura óptica ou opacidade do caminho de comprimento S e é função de todos os valores de K_η entre 0 e S . Como K_η é função de parâmetros locais p , T e \bar{c}_α , a espessura óptica é função de todas estas condições ao longo do caminho entre 0 e S . A espessura óptica é uma medida da habilidade de uma trajetória em atenuar a radiação de um dado comprimento de onda; uma espessura óptica grande fornece grande atenuação.

Para um meio com composição, temperatura, e pressão uniformes, ou para um meio com K_η independente de T , p e \bar{c}_α , a Eq. (3.22) se torna,

$$\tau_\eta(S) = K_\eta S \quad (3.24)$$

Se $\tau_\eta(S) \gg 1$, o caminho S no meio é opticamente espesso. Se $\tau_\eta(S) \ll 1$, o caminho S no meio é opticamente fino, assim a radiação pode passar completamente através da trajetória sem que aconteça muita atenuação.

3.3.2 Aumento da intensidade de radiação devido à emissão

Para a emissão de energia no interior de um meio participante, considera-se um volume elementar dV do meio, conforme mostrado na Fig. 3.4, com um coeficiente de absorção $\kappa_\eta(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha)$. Assume-se que dV está no centro de uma grande cavidade esférica com superfície negra de raio R e com temperatura uniforme T . O espaço entre dV e a superfície da cavidade está preenchido com um meio não-participante (transparente). A intensidade espectral incidente sobre dA_s em dV , emitida pelo elemento dA sobre a superfície da cavidade é $I_\eta(S, 0) = I_{\eta, CN}(\eta, T)$. A alteração desta intensidade em dV como resultado de absorção é $-I_\eta(0)\kappa_\eta dS = -I_{\eta, CN}(\eta, T)\kappa_\eta dS$. A energia absorvida pelo volume diferencial $dS dA_s$ é $I_{\eta, CN}(\eta, T)\kappa_\eta dS dA_s d\eta d\omega$, onde $d\omega = dA/R^2$ e dA_s é a área projetada normal a $I_\eta(0)$. A energia emitida por dA e absorvida por todo volume dV é encontrada pela integração sobre dV

(sobre todos os elementos $dSdA_s$), de forma a obter $I_{\eta,CN}(\eta,T)\kappa_{\eta}dVd\eta d\omega$. Para levar em conta toda a energia incidente sobre dV a partir de toda superfície da cavidade negra esférica, integra-se sobre todos os ângulos sólidos, obtendo-se $4\pi\kappa_{\eta}I_{\eta,CN}(\eta,T)dVd\eta$.

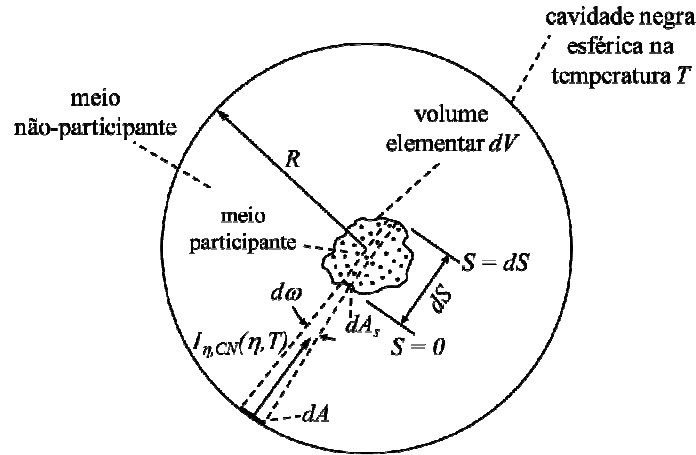


Figura 3.4 - Geometria utilizada para dedução do aumento de intensidade de radiação devido à emissão em um meio participante (adaptado de Siegel e Howell, 2002).

Para manter o equilíbrio no interior da cavidade esférica, dV deve emitir energia igual àquela absorvida. Assim, a emissão espectral por um volume elementar isotérmico é dada por:

$$4\pi\kappa_{\eta}I_{\eta,CN}(\eta,T)dVd\eta = 4\kappa_{\eta}E_{\eta,CN}(\eta,T)dVd\eta \quad (3.25)$$

A Eq. (3.25) é válida para volumes elementares dV suficientemente pequenos, de tal forma que toda energia emitida dentro de dV escape antes de ser reabsorvida no interior do volume.

Para todas as condições consideradas, a emissão é uniforme sobre todas as direções, assim a energia espectral emitida por um volume elementar em qualquer direção, dI_{η_e} , é obtida dividindo a Eq. (3.25) por $4\pi d\eta$ e pela área da seção transversal dA_s , obtendo-se,

$$dI_{\eta_e}(\eta,T,p,\bar{c}_{\alpha}) = \kappa_{\eta}(\eta,T,p,\bar{c}_{\alpha})I_{\eta,CN}(\eta,T)dS \quad (3.26)$$

3.3.3 Aumento da intensidade de radiação devido ao espalhamento

As relações de espalhamento descritas na Seção 3.3.1 são para a intensidade de radiação perdida por ter sido espalhada para fora da direção considerada. Porém, também é necessário considerar o aumento de intensidade de radiação em uma determinada direção devido ao espalhamento incidente proveniente de outras direções. Para isto, deve-se conhecer a distribuição direcional da intensidade de radiação espalhada, a qual é dada por uma função de fase.

Considere a radiação dentro do ângulo sólido $d\omega_i$ que é incidente sobre dA na Fig. 3.5. A porção de intensidade incidente que é espalhada para fora em dS é dada pela Eq. (3.21) como $dI_{\eta s} = \sigma_{s\eta} I_{\eta} dS$.

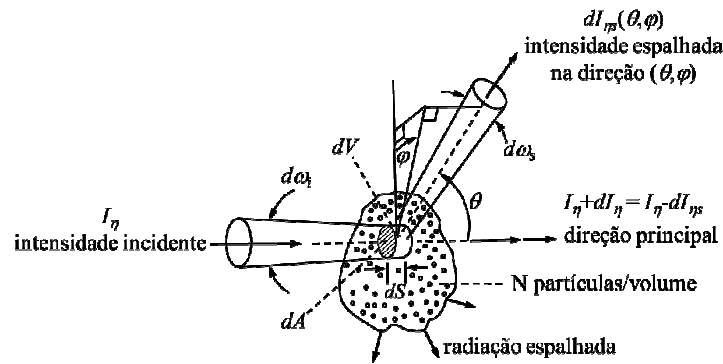


Figura 3.5 - Espalhamento de intensidade de radiação incidente dentro do ângulo sólido $d\omega_i$ para a direção (θ, φ) (adaptado de Siegel e Howell, 2002).

Como mostrado na Fig. 3.5, a intensidade espalhada produz uma distribuição de intensidade em função dos ângulos θ e φ . A intensidade espalhada na direção (θ, φ) é definida como a energia espalhada naquela direção por unidade de ângulo sólido da direção espalhada e por unidade de área normal e ângulo sólido da radiação incidente,

$$dI_{\eta,s}(\theta, \varphi) \equiv \frac{\text{energia espectral espalhada na direção } (\theta, \varphi)}{d\omega_s dA d\omega_i d\eta} \quad (3.27)$$

A função de fase $\Phi(\theta, \varphi)$ descreve a distribuição angular da intensidade espalhada. Ela relaciona a magnitude direcional de $dI_{\eta,s}(\theta, \varphi)$ com a intensidade total $dI_{\eta,s}$ espalhada,

$$dI_{\eta,s}(\theta, \varphi) = dI_{\eta,s} \frac{\Phi(\theta, \varphi)}{4\pi} = \sigma_{\eta,s} I_{\eta} dS \frac{\Phi(\theta, \varphi)}{4\pi} \quad (3.28)$$

A relação entre $dI_{\eta,s}$ e $dI_{\eta,s}(\theta, \varphi)$ é dada por,

$$dI_{\eta,s} = \int_{\omega_s=0}^{4\pi} dI_{\eta,s}(\theta, \varphi) d\omega_s \quad (3.29)$$

Substituindo a Eq. (3.28) na Eq. (3.29), encontra-se a função de fase,

$$\Phi(\theta, \varphi) = \frac{dI_{\eta,s}(\theta, \varphi)}{(1/4\pi) \int_{\omega_s=0}^{4\pi} dI_{\eta,s}(\theta, \varphi) d\omega_s} \quad (3.30)$$

Para calcular o espalhamento a partir de todas as direções, considere a incidência da radiação a um ângulo (θ, φ) , com intensidade de radiação $I_{\eta}(\theta, \varphi)$, conforme mostrado na Fig. 3.6. Quando esta intensidade atinge dV , ela passa através de uma camada de meio participante igual a $dS/\cos\theta$. Para a radiação na direção S , a intensidade espalhada a partir de $I_{\eta}(\theta, \varphi)$ na direção de $I_{\eta}(S)$ é

$$dI_{\eta,s} = \sigma_{s\eta} I_{\eta}(\theta, \varphi) \frac{dS}{\cos\theta} \frac{\Phi(\theta, \varphi)}{4\pi} \quad (3.31)$$

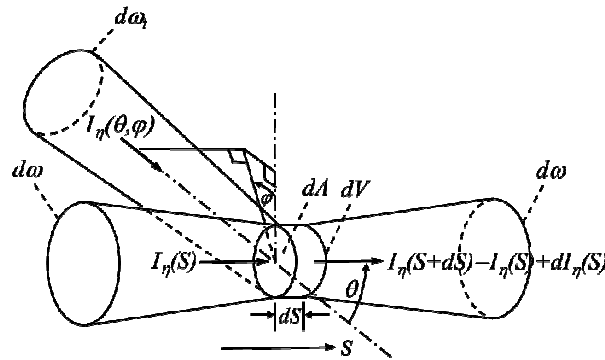


Figura 3.6 - Espalhamento de energia para dentro da direção S [Siegel e Howell, 2002].

Entretanto, $dI_{\eta,s}$ é definida como a energia na direção espalhada por unidade de número de onda, por unidade de ângulo sólido espalhado, por unidade de ângulo sólido incidente, e por unidade de área normal à intensidade de radiação incidente. Então a energia espectral espalhada na direção S como um resultado de $I_{\eta}(\theta, \varphi)$ é, pelo uso da Eq. (3.31),

$$dI_{\eta,s}d\omega d\omega_i d\eta dA \cos \theta = \sigma_{s\eta} I_{\eta}(\theta, \varphi) \left(\frac{dS}{\cos \theta} \right) \left[\frac{\Phi(\theta, \varphi)}{4\pi} \right] d\omega d\omega_i d\eta dA \cos \theta = \sigma_{s\eta} I_{\eta}(\theta, \varphi) dS \left[\frac{\Phi(\theta, \varphi)}{4\pi} \right] d\omega d\omega_i d\eta dA \quad (3.32)$$

Dividindo por $d\omega d\eta dA$, a contribuição desta energia espalhada para a intensidade espectral na direção S é $\sigma_{s\eta} I_{\eta}(\theta, \varphi) [\Phi(\theta, \varphi)/4\pi] d\omega_i dS$. Para considerar as contribuições do espalhamento a partir de todas as direções (θ, φ) , esta é integrada sobre todos $d\omega_i$. Considera-se que as partículas espalhadas são orientadas randomicamente, de tal forma que a seção transversal de espalhamento $\sigma_{s\eta}$ seja independente da direção incidente. O aumento de intensidade na direção S pelo espalhamento que atinge o meio é então:

$$dI_{\eta,s} = \frac{\sigma_{s\eta} dS}{4\pi} \int_{\omega_i=0}^{4\pi} I_{\eta}(\theta, \varphi) \Phi(\theta, \varphi) d\omega_i = \frac{\sigma_{s\eta} dS}{4\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} I_{\eta}(\theta, \varphi) \Phi(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi \quad (3.33)$$

3.3.4 Equação de transferência radiativa

Somando as parcelas de atenuação por absorção (Eq. 3.16) e espalhamento (Eq. 3.21) com as parcelas de aumento por emissão (Eq. 3.26) e espalhamento (3.33) obtém-se a equação de transferência radiativa (ETR),

$$\frac{dI_{\eta}}{dS} = -\kappa_{\eta}(S)I_{\eta}(S) + \kappa_{\eta}(S)I_{CN,\eta}(S) - \sigma_{s\eta}(S)I_{\eta}(S) + \frac{\sigma_{s\eta}(S)}{4\pi} \int_{\omega_i=0}^{4\pi} I_{\eta}(S, \omega_i) \Phi_{\eta}(\omega, \omega_i) d\omega_i \quad (3.34)$$

No presente trabalho, as parcelas de atenuação e aumento da intensidade de radiação no meio em decorrência do espalhamento serão desprezadas, uma vez que a chama em estudo é proveniente da queima de metano, o qual possui baixa formação de fuligem. A fração

volumétrica de fuligem em uma chama de metano foi medida experimentalmente por Brookes e Moss, 1999a, os quais reportaram o valor máximo de $2,0 \times 10^{-7}$. Segundo Modest, 1993, os efeitos do espalhamento podem ser desprezados desde que a fração volumétrica de fuligem seja inferior a $8,0 \times 10^{-3}$, sendo que chamas e camadas de fumaça possuem fração volumétrica de fuligem de no máximo $1,0 \times 10^{-4}$. Mazumder e Modest, 1999, e Brookes e Moss, 1999b, desprezaram os efeitos do espalhamento no cálculo da radiação em suas simulações de chamas de metano. Gupta et al., 2013, simularam a transferência radiativa em uma chama de metano e em chamas sintéticas com fração volumétrica de fuligem de até $4,0 \times 10^{-6}$ também desprezando os efeitos do espalhamento. Assim, para o caso em que o meio participante não espalha, a ETR fica,

$$\frac{dI_{\eta}}{dS} = -\kappa_{\eta}(S)I_{\eta}(S) + \kappa_{\eta}(S)I_{CN,\eta}(S) \quad (3.35)$$

3.4 Modelos espectrais do coeficiente de absorção dos gases

Um gás participante pode ser composto por moléculas, átomos, íons, e elétrons livres que podem assumir diferentes níveis de energia. Em uma molécula, os átomos formam um sistema dinâmico com modos vibracionais e rotacionais que possuem níveis de energia específicos. Quando ocorre emissão de energia radiativa, fótons são liberados, enquanto na absorção de energia, eles são capturados. Assim, quando um fóton é emitido ou absorvido, a energia da partícula emissora ou absorvedora é reduzida ou aumentada, respectivamente. Os três tipos de transições nos níveis de energia que podem ocorrer são: *bound-bound*, *bound-free* (ou *free-bound*), *free-free*. Como uma determinada frequência (ou número de onda) está associada com a transição de um nível de energia para outro, na ausência de outros efeitos, o espectro da radiação é composto por linhas espectrais de espessura infinitesimal posicionadas naquela frequência. Entretanto, estas linhas possuem largura espectral finita, resultante de vários efeitos de alargamento discutidos a seguir. Devido a estes motivos, as propriedades radiativas dos gases exibem forte dependência espectral, conforme ilustrado na Fig. 3.7.

Os efeitos de alargamento fazem com que a linha espectral infinitesimal seja alargada e conseqüentemente tenha uma faixa finita de número de onda ao redor do número de onda de transição η_{ij} . Alguns dos mecanismos de alargamento são o natural, Doppler, por colisão e

Stark. O alargamento por colisão é o mais importante para muitas condições de engenharia envolvendo radiação no infravermelho.

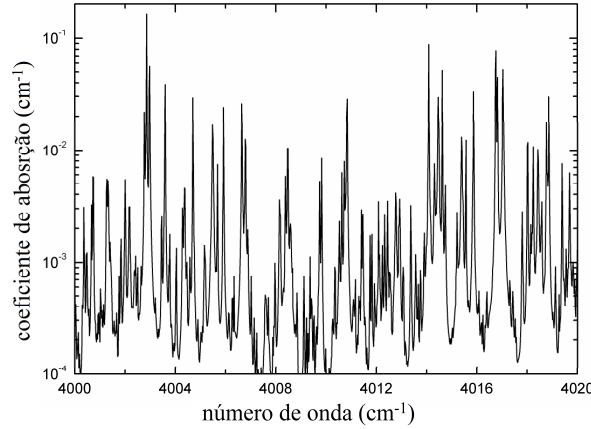


Figura 3.7 - Espectro do coeficiente de absorção de H₂O para $T = 2000$ K e $p_{H_2O} = 0,1$ atm (adaptado de Mossi et al., 2012).

No alargamento por colisão, conforme a pressão do gás aumenta, a taxa de colisão dos átomos ou moléculas é aumentada. As colisões podem perturbar os estados de energia dos átomos ou moléculas, resultando em alargamento das linhas espectrais. O alargamento por colisão tem sua expressão baseada no perfil de Lorentz, sendo determinado pela seguinte equação:

$$\frac{\kappa_{\eta,ij}(\eta)}{S_{ij}} = \frac{\gamma_c / \pi}{\gamma_c^2 + (\eta - \eta_{ij})^2} \quad (3.36)$$

onde S_{ij} é a intensidade da linha, determinada pela integral abaixo da curva $\kappa_{\eta,ij}(\eta)$. A meia largura de colisão γ_c é determinada pela taxa de colisão, e pode ser aproximada a partir da teoria cinética por,

$$\gamma_c = \frac{1}{2\pi\epsilon_0} \frac{4\sqrt{\pi}D^2p}{(MkT)^{1/2}} \quad (3.37)$$

onde D é o diâmetro da molécula, M é a massa da molécula, k é a energia cinética da

molécula, e p é a pressão do gás. O alargamento por colisão é frequentemente o contribuinte principal para o alargamento de linhas em condições de engenharia no infravermelho, e os outros mecanismos podem usualmente ser desprezados [Siegel e Howell, 2002].

A solução da ETR, Eq. (3.35), exige o conhecimento do comportamento espectral do coeficiente de absorção. Uma forma de considerar tal comportamento é através do modelo linha-por-linha (LBL – do inglês: *line-by-line*), no qual a ETR é resolvida em todos os números de onda em que o coeficiente de absorção é fornecido; outra forma é através da aplicação de modelos espectrais. O modelo LBL fornece resultados de elevada precisão, porém esses cálculos exigem muito esforço computacional, inviabilizando por ora a sua aplicação acoplada para solução da maioria dos problemas reais de engenharia. Outro ponto a ser observado diz respeito as não-uniformidades nas distribuições de temperatura e concentração das espécies químicas, as quais afetam o coeficiente de absorção espectral das misturas. Assim, vários modelos espectrais de gases reais têm sido e continuam sendo desenvolvidos. Os modelos espectrais simplificam o problema da quantidade de informações espectrais e reduzem consideravelmente o tempo computacional.

Dentre os vários modelos de gases disponíveis na literatura, o mais antigo e simples é o modelo de gás cinza (GC), onde o coeficiente de absorção é assumido independente do número de onda e as únicas variáveis são a temperatura e a concentração, como dado, por exemplo, pelas correlações de Barlow et al., 2001, e de Cassol et al., 2014. Contudo, esse modelo representa uma aproximação muito rudimentar, normalmente não sendo capaz de fornecer resultados precisos.

O modelo WSGG, desenvolvido por Hottel e Sarofim, 1967, considera que o meio participante é composto por gases cinza, e a ponderação de cada um desses gases cinza é determinada de acordo com a fração de energia radiativa no intervalo espectral em que cada gás está contido. Hottel e Sarofim, 1967, desenvolveram o modelo WSGG dentro do contexto do método das zonas [Hottel e Cohen, 1958]. Smith et al., 1982, propuseram correlações para os coeficientes de absorção e para os coeficientes de ponderação tanto para as moléculas de H₂O, quanto para as moléculas de CO₂. Posteriormente, Modest, 1991, demonstrou que o modelo WSGG pode ser usado juntamente com qualquer método de solução para a equação de transferência radiativa. Dentre os modelos existentes, atualmente esse é o mais conhecido e amplamente usado em softwares comerciais, devido à exigência computacional compatível para aplicação a problemas práticos de engenharia e por apresentar resultados expressivamente melhores do que o modelo de gás cinza.

Atualmente, as bases de dados espectrais, como o HITRAN (do inglês: *high-resolution transmission molecular absorption database*), o HITEMP (do inglês: *high-temperature molecular spectroscopic database*) e o CDS (do inglês: *high-temperature carbon dioxide spectroscopic database*), tornaram possível a obtenção das propriedades espectrais dos gases com um nível muito elevado de detalhamento. Com essas informações, a transferência de calor por radiação térmica pode ser resolvida de maneira precisa pelo método linha-por-linha, desenvolvido por Hartmann et al., 1983, o qual considera individualmente cada linha do espectro. Contudo, o método LBL é de difícil implementação e de elevado custo computacional, devido ao grande número de equações a serem resolvidas, como já mencionado. Assim, essa metodologia é aplicada somente em casos especiais, na obtenção de soluções *benchmark*, servindo como base de comparação para os modelos espectrais.

Para encontrar soluções da transferência de energia radiativa total, as equações de transporte podem ser resolvidas em muitos intervalos no espectro e então realizar uma integração nestes intervalos. Uma vez que o coeficiente de absorção varia de modo irregular com o número de onda, esta integração requer a solução das equações de transferência para muitos intervalos espectrais. O modelo da distribuição- k reduz a extensão destes cálculos, pois assume que a intensidade espectral de corpo negro local não varia significativamente ao longo de uma banda de absorção e pode ser tratada como constante sobre a largura de banda. Esse método mostrou-se ineficiente para meios não-homogêneos ou não-isotérmicos.

Para os problemas em que os meios participantes são não-isotérmicos e não-homogêneos, ou seja, nos quais 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 radiativa 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 radiativa 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.

O modelo SLW, proposto por Denison e Webb, 1993a, permite a obtenção dos coeficientes de ponderação dos gases cinza a partir de dados calculados pelo método LBL, porém este modelo não apresentou bons resultados para problemas não-homogêneos e/ou não-isotérmicos. Posteriormente, Denison e Webb, 1993b, propuseram a função distribuição das linhas de absorção do corpo negro (função distribuição ALB), 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, e a aplicaram ao modelo SLW, melhorando os resultados para problemas não-homogêneos e não-isotérmicos. Denison e Webb, 1993b, 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 modelo SLW mais simples e as soluções mais rápidas. Denison e Webb, 1995, mostraram que é possível aplicar a ideia do modelo 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.

O modelo CW (do inglês: *Cumulative Wavenumber*), desenvolvido por Solovjov e Webb, 2002, resolve a equação de transferência radiativa em meios uniformes e não-uniformes, e baseia-se 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, gerando assim uma função não-decrescente. Solovjov e Webb, 2005, estenderam a aplicação do modelo CW aos meios com mistura de gases e ainda o aplicaram a casos envolvendo fuligem. 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, assim, dentro de cada camada, o estado termodinâmico é considerado constante, reduzindo o esforço computacional. 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 modelo não prediz o fluxo radiativo com a mesma exatidão que o divergente do fluxo é estimado. Dessa forma, foi proposta uma correção para essas deficiências do modelo, satisfazendo assim o balanço de energia, porém deixando o modelo CW mais lento, sendo a nova técnica indicada somente para casos em que se necessita calcular tanto o divergente do fluxo quanto o fluxo de calor no meio.

O modelo FSK (do inglês: *full spectrum k-distribution*), proposto por Modest e Zhang, 2002, usa as hipóteses do *k*-correlacionado e da distribuição-*k*. Wang e Modest, 2006, aplicaram o modelo FSK com o método de Monte Carlo, mostrando que, em aplicações tridimensionais, a técnica pode reduzir o uso de memória e o tempo computacional.

Mossi et al., 2010b, investigaram os efeitos dos modelos espectrais do coeficiente de absorção sobre o divergente do fluxo de calor radiativo em uma chama difusiva laminar de

metano-ar em geometria cilíndrica axissimétrica, considerando campos prescritos de temperatura, concentração de gases, e fuligem. Os modelos utilizados foram o CW, SLW, GC e WSGG, sendo o primeiro utilizado como padrão para comparação dos resultados. 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 Cassol, 2013, a base de dados espectrais HITEMP 2010 foi empregada no cálculo da transferência de calor radiativa em problemas unidimensionais compostos por meios não-isotérmicos e não-homogêneos (CO_2 , H_2O e fuligem), empregando os modelos SLW, CW, WSGG e GC, os quais tiveram seus resultados comparados a solução *benchmark* (LBL). Observou-se que, para as condições térmicas e concentrações de espécies consideradas, o modelo WSGG forneceu os melhores resultados para os termos fonte radiativos para as situações em que o meio foi considerado composto somente por gases (CO_2 e H_2O), ou composto por gases e fuligem, especialmente para o caso que considerou fração volumétrica de fuligem $1,0 \times 10^{-7}$, sendo esta quantidade típica para chamas de metano-ar.

O tratamento das propriedades espectrais de gases, ou mistura de gases, é uma etapa fundamental na obtenção de resultados precisos na determinação da quantidade de energia trocada por radiação térmica. Apesar do progresso considerável dos modelos espectrais nas últimas décadas, há ainda um amplo espaço para a pesquisa de métodos que permitam a solução prática e computacionalmente viável dos problemas envolvendo meios participantes em radiação térmica, principalmente no processo de combustão. São também necessários testes que validem de forma mais abrangente a aplicação dos modelos atuais, conduzindo a novos aperfeiçoamentos.

A seguir serão apresentadas as abordagens que serão empregadas no presente trabalho: o modelo linha-por-linha (LBL), o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG), e o modelo de gás cinza (GC).

No presente trabalho, os modelos WSGG e GC serão empregados no cálculo do campo de radiação na chama de maneira acoplada aos cálculos do escoamento reativo, enquanto a solução *benchmark* LBL do campo de radiação será obtida posteriormente considerando campos fixos de temperatura e concentrações de espécies gasosas e fuligem (cálculo desacoplado radiação-CFD), permitindo assim uma avaliação quantitativa do erro no cálculo do campo de radiação devido ao emprego dos modelos WSGG e GC.

3.4.1 Modelo linha-por-linha

A partir da década de 1980, com o desenvolvimento dos computadores, é que se tornaram possíveis os cálculos linha-por-linha. Tais cálculos baseiam-se no conhecimento detalhado das linhas espectrais, as quais são obtidas de bancos de dados espectrais, tais como o HITRAN, o HITEMP e o CDSO.

O banco de dados HITRAN foi originalmente criado para análises da atmosfera terrestre, e apresenta os parâmetros medidos na 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. Para estudos de combustão, é mais apropriada a utilização do banco de dados HITEMP, que é análogo ao HITRAN, porém os dados foram obtidos em temperaturas elevadas (1000 K e 1500 K), e apresenta os parâmetros apenas para as moléculas de H₂O, CO₂, CO, NO e OH. A última atualização para o HITEMP foi publicada por Rothman et al., 2010. Já o banco de dados CDSO apresenta os dados para a molécula de CO₂, medidos nas temperaturas de 296, 1000 e 2000 K.

Através dos bancos de dados espectrais é possível determinar o coeficiente de absorção espectral para cada número de onda, temperatura e concentração dos gases, e a partir destes realizar os cálculos de transferência radiativa. A solução da ETR baseada em cada linha espectral do coeficiente de absorção denomina-se solução linha-por-linha.

Para a determinação do coeficiente de absorção espectral, primeiramente deve-se calcular a seção-transversal de absorção, C_η ,

$$C_\eta(\eta) = \sum_i \frac{S_i}{\pi} \frac{\gamma_i}{\gamma_i^2 + (\eta - \eta_i)^2} \quad (3.38)$$

onde S_i é a intensidade para cada linha i do banco de dados em um determinado número de onda η_i , η_i é a posição espectral da linha, e γ_i é a meia-largura para cada transição, que é calculada como,

$$\gamma_i = \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^n [p_s \gamma_{self,i} + (1 - p_s) \gamma_{ar,i}] \quad (3.39)$$

na qual $\gamma_{self,i}$ é a meia-largura devido ao alargamento da própria molécula em questão, $\gamma_{ar,i}$ é

o alargamento devido ao ar, p_s é a pressão parcial da espécie participante, n é o coeficiente de dependência da temperatura, e T_{ref} é a temperatura de referência em que está compilado o banco de dados. Os valores de $\gamma_{self,i}$, $\gamma_{ar,i}$, S_i e n são fornecidos pelo banco de dados. O valor da pressão parcial da espécie participante deve ser menor ou igual a 1 atm, com pressão total de 1 atm.

Desta maneira, é possível gerar um espectro para valores de seção-transversal de absorção, variando-se η para as regiões de interesse, normalmente entre os valores de 0 cm^{-1} a $1,0 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$, sendo esta a faixa disponível no HITEMP 2010. O espectro da seção transversal deve apresentar uma resolução de dezenas de milhares de pontos no eixo das abcissas para que se possam representar os diversos picos de absorção mais importantes de determinada espécie.

Com os valores de seção-transversal de absorção, obtém-se o coeficiente de absorção por unidade de pressão, em unidade de $\text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$,

$$\kappa_{\eta,p} = N_L C_\eta \quad (3.40)$$

onde N_L é o número de Loschmidt, dependente da temperatura, dado por [Killinger e Plutov, 2009],

$$N_L = 2,479 \times 10^{19} \left(\frac{296}{T} \right) \quad (3.41)$$

na qual N_L tem unidades de $\text{moléculas} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{atm}^{-1}$ e T é a temperatura, em K. Assim, pode-se obter o coeficiente de absorção pela relação $\kappa_\eta = p \kappa_{\eta,p}$, onde p é a pressão parcial.

O coeficiente de absorção κ_η é obtido para cada gás participante em separado. No caso de uma mistura de gases, para quantificar o efeito de mais de um gás atuando simultaneamente, tal como CO_2 e H_2O , o coeficiente de absorção total da mistura é dado pela soma dos coeficientes de absorção individuais,

$$\kappa_{\eta,g} = p_{\text{CO}_2} \kappa_{\eta,p,\text{CO}_2} + p_{\text{H}_2\text{O}} \kappa_{\eta,p,\text{H}_2\text{O}} \quad (3.42)$$

onde $\kappa_{\eta,g}$ é o coeficiente de absorção total da mistura gasosa, em cm^{-1} .

No método linha-por-linha resolve-se a equação de transferência radiativa, Eq. (3.35), em todos os números de onda em que o coeficiente de absorção é fornecido pelo espectro, nos diferentes pontos da geometria da câmara de combustão, considerando o estado termodinâmico local dos gases.

Este modelo é o que fornece os resultados mais próximos da realidade, mas possui muitas limitações computacionais, pois, dependendo do caso a ser resolvido, a solução torna-se impraticável. A solução da Eq. (3.35) utilizando o método de ordenadas discretas para as direções e o método de diferenças finitas para a discretização da derivada espacial em um problema unidimensional, requer a solução de $L \times M \times N$ equações, onde L é o número de direções, M é o número de pontos na malha (geometria), e N é o número de coeficientes de absorção para a faixa de números de onda considerada pelo banco espectral. Assim, para um problema unidimensional, considerando 12 direções (método S_6 , conforme será visto no Cap. 4 deste trabalho), 200 pontos na malha e 30000 valores para o coeficiente de absorção (correspondendo à resolução espectral de $0,33 \text{ cm}^{-1}$), o número de equações a serem resolvidas é de $72,0 \times 10^6$. Para um problema bidimensional, considerando 24 direções do método S_6 , 6000 pontos na malha, e 30000 valores para o coeficiente de absorção, o número de equações atinge $4320,0 \times 10^6$.

Este método é o que fornece os resultados mais precisos e que são usados como *benchmarks* na validação de modelos do coeficiente de absorção, os quais são utilizados para tornar viável a solução do problema radiativo em cálculos acoplados com outros mecanismos de transporte.

No presente trabalho, após a solução acoplada entre o problema de radiação e o problema de escoamento reativo (solução das equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia, e espécies químicas), o modelo de solução linha-por-linha (LBL) será empregado para solução da Eq. (3.35) em uma metodologia na qual os cálculos de radiação serão desacoplados dos cálculos das equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia, espécies químicas, etc. Assim, a Eq. (3.35) será resolvida com campos prescritos de temperaturas e de concentrações de espécies, obtidos a partir de soluções prévias das equações de conservação citadas. A mesma metodologia de cálculo desacoplado utilizando campos prescritos de temperaturas e concentrações de espécies será aplicada para a solução da Eq. (3.35) utilizando os modelos WSGG e GC (apresentados a seguir), com o

objetivo de comparar os resultados dos campos de radiação obtidos da solução LBL com aqueles obtidos com os dois modelos ora citados, permitindo assim uma avaliação quantitativa dos resultados destes modelos.

3.4.2 Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG – do inglês: *weighted-sum-of-gray-gases*) foi desenvolvido por Hottel e Sarofim, 1967, e visa substituir a variação espectral do coeficiente de absorção por um pequeno número de gases cinza. A partir deste modelo, a emitância total ao longo de um caminho S pode ser calculada por:

$$\varepsilon(pS) = \sum_{i=0}^{N_G} a_j(T) \left(1 - e^{-\kappa_j pS}\right) \quad (3.43)$$

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

Smith et al., 1982, propuseram que os coeficientes de ponderação a_j fossem representados por polinômios,

$$a_j(T) = \sum_{k=1}^K b_{j,k} T^{k-1} \quad (3.44)$$

onde j é o gás cinza ($j = 1, \dots, N_G$), e $K-1$ é o grau do polinômio. Assim, Smith et al., 1982, obtiveram os polinômios dos coeficientes de ponderação a_j e os coeficientes de absorção κ_j ajustados para misturas de vapor de água e dióxido de carbono para temperaturas de 600 K a 2400 K e pressões parciais multiplicadas pelo caminho de 0,001 atm·m a 10 atm·m utilizando como base os valores de emitâncias totais obtidas do modelo de banda larga exponencial. Os coeficientes κ_j e $b_{j,k}$ obtidos por Smith et al., 1982, estão apresentados na Tab. 3.1, para razão de pressões parciais $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$, o qual é o valor tipicamente considerado para combustão de metano. Observa-se que na Tab. 3.1 o subscrito g refere-se aos gases, uma vez que

posteriormente haverá um subscrito s referindo-se a fuligem. Ainda, o ajuste das emitâncias totais para obtenção dos coeficientes a_j e κ_j é feito com a restrição de que o somatório dos coeficientes a_j seja igual a um, ou seja, $\sum_{j=0}^{N_G} a_j = 1$.

Tabela 3.1 - Coeficientes do modelo WSGG para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ [Smith et al., 1982].

j	$\kappa_{g,j,p}$ [$m^{-1}atm^{-1}$]	$b_{g,j,1} \times 10^1$	$b_{g,j,2} \times 10^4$ [K^{-1}]	$b_{g,j,3} \times 10^7$ [K^{-2}]	$b_{g,j,4} \times 10^{11}$ [K^{-3}]
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

Com o modelo WSGG, a ETR, Eq. (3.35), fica da seguinte forma:

$$\frac{dI_j}{dS} = -\kappa_j I_j + \kappa_j a_j(T) I_{CN}(T) \quad (3.45)$$

com j variando de 0 até 3 ($N_G = 3$, no caso do modelo de Smith et al., 1982). A Eq. (3.45) deve ser resolvida com a condição de contorno [Modest, 1991],

$$I_{w,j} = a_j(T_w) I_{CN}(T_w) \quad (3.46)$$

na qual o subscrito w refere à parede.

Após o cálculo das intensidades I_j , a intensidade de radiação total pode então ser determinada por,

$$I = \sum_{j=0}^{N_G} I_j \quad (3.47)$$

O modelo WSGG tem sido bastante utilizado em cálculos acoplados de transferência de calor radiativa e dinâmica de fluidos computacional em decorrência da sua boa relação entre precisão dos resultados e exigência computacional, e está disponível para utilização em softwares comerciais, como, por exemplo, Fluent, CFX, StarCD, etc.

O modelo WSGG com os coeficientes obtidos por Smith et al., 1982, também tem sido bastante utilizado, porém alguns trabalhos foram recentemente publicados com o objetivo de atualizar tais coeficientes com dados espectrais mais atuais [Dorigon et al., 2013; Krishnamoorthy, 2010a], ou para considerar nestes coeficientes os efeitos das variações das pressões parciais das espécies [Johansson et al., 2011], uma vez que normalmente os coeficientes a_j e κ_j são ajustados para razões fixas de pressões parciais, como por exemplo $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$.

O modelo WSGG de Dorigon et al., 2013, empregado no presente trabalho, está apresentado a seguir.

Modelo WSGG de Dorigon et al., 2013

Dorigon et al., 2013, determinaram novos coeficientes para o modelo WSGG, realizando o ajuste das curvas de emitância total em relação àquelas calculadas a partir da integração linha-por-linha, usando as linhas espectrais obtidas através da base de dados espectrais HITEMP 2010 [Rothman et al., 2010], a qual é a versão mais recente da base de dados espectrais. Os coeficientes obtidos por Dorigon et al., 2013, estão apresentados na Tab. 3.2, onde observa-se que os autores consideraram quatro gases cinza ($N_G = 4$).

Tabela 3.2 - Coeficientes do modelo WSGG para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ [Dorigon et al., 2013].

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

3.4.3 Modelo de gás cinza

No modelo de gás cinza (GC), considera-se que o coeficiente de absorção κ seja independente do número de onda, podendo assumir um valor constante ou, de maneira mais elegante, ser função da temperatura e da concentração do meio.

Com o modelo GC, a ETR, Eq. (3.35), fica da seguinte forma:

$$\frac{dI}{dS} = -\kappa I + \kappa I_{CN}(T) \quad (3.48)$$

No presente trabalho foi adotado o modelo GC apresentado em Cassol et al., 2014, o qual fornece uma correlação para o coeficiente de absorção na forma de uma função polinomial:

$$\kappa_i = p_i (c_0 + c_1 T + c_2 T^2 + c_3 T^3 + c_4 T^4 + c_5 T^5) \quad (3.49)$$

onde o subscrito i representa cada espécie química (H_2O ou CO_2), e os coeficientes c_0 , c_1 , c_2 , c_3 , c_4 , e c_5 estão apresentados na Tab. 3.3. Esta função polinomial foi ajustada por Cassol et al., 2014, separadamente para cada espécie química, utilizando o banco de dados espectrais HITEMP 2010, através da seguinte relação,

$$\kappa = \frac{\int_{\eta} \kappa_{\eta} I_{CN,\eta} d\eta}{\int_{\eta} I_{CN,\eta} d\eta} \quad (3.50)$$

Tabela 3.3 – Coeficientes polinomiais para o cálculo do coeficiente de absorção para o modelo GC [Cassol et al., 2014].

	$i = \text{CO}_2$	$i = \text{H}_2\text{O}$
$c_0 [\text{cm}^{-1}\text{atm}^{-1}]$	$-6,4750 \times 10^{-1}$	$7,5702 \times 10^{-1}$
$c_1 [\text{cm}^{-1}\text{atm}^{-1}\text{K}^{-1}]$	$4,2895 \times 10^{-3}$	$-1,9716 \times 10^{-3}$
$c_2 [\text{cm}^{-1}\text{atm}^{-1}\text{K}^{-2}]$	$-6,6089 \times 10^{-6}$	$2,1998 \times 10^{-6}$
$c_3 [\text{cm}^{-1}\text{atm}^{-1}\text{K}^{-3}]$	$4,4190 \times 10^{-9}$	$-1,2492 \times 10^{-9}$
$c_4 [\text{cm}^{-1}\text{atm}^{-1}\text{K}^{-4}]$	$-1,3796 \times 10^{-12}$	$3,5385 \times 10^{-13}$
$c_5 [\text{cm}^{-1}\text{atm}^{-1}\text{K}^{-5}]$	$1,6484 \times 10^{-16}$	$-3,9663 \times 10^{-17}$

Após o cálculo do coeficiente de absorção de cada espécie utilizando a Eq. (3.49), o

coeficiente de absorção da mistura gasosa é determinado por,

$$\kappa = \kappa_{H_2O} + \kappa_{CO_2} \quad (3.51)$$

para então ser empregado na ETR, Eq. (3.48).

O modelo GC é o de implementação mais simples dentre os modelos espectrais existentes, pois considera que o coeficiente de absorção da espécie química seja constante em relação a todo o espectro. Conforme mostrado na Fig. 3.7, essa hipótese é bastante rudimentar, observando-se que o coeficiente de absorção para uma espécie química gasosa varia fortemente com o número de onda.

Contudo, ele ainda é muito utilizado devido à sua simplicidade, e consequente economia computacional, o que o torna importante quando a solução da ETR precisa estar acoplada com a solução de outras equações de conservação em aplicações reais de engenharia, como em simulações de grandes caldeiras industriais, ou ainda em estudos das interações TRI empregando LES ou DNS, os quais mesmo isolados apresentam uma alta demanda computacional. Diversos trabalhos podem ser citados utilizando o modelo GC, tais como Dos Santos et al., 2014, Crnomarkovic et al., 2013, Mossi et al., 2012, Cassol et al., 2012, Edge et al., 2011, Demarco et al., 2011, Silva et al., 2010, Dos Santos et al., 2009, Narayanan e Trouvé, 2009, Klason et al., 2008, Saji et al., 2008, Deshmukh et al., 2008.

3.5 Radiação da fuligem

Como mostrado pela microscopia eletrônica, as partículas de fuligem são pequenas e podem ser consideradas como aglomerados aproximadamente esféricos, possuindo tamanhos que variam de 0,005 μm à 0,08 μm , tendo 0,3 μm em casos extremos. As partículas de fuligem podem aparecer em aglomerados com frações volumétricas na chama de aproximadamente 10^{-7} a 10^{-4} . De forma a determinar as propriedades radiativas de uma nuvem de fuligem, é necessário conhecer a quantidade, forma e distribuição da fuligem, tanto quanto suas propriedades ópticas, que dependem da composição química e da porosidade das partículas [Modest, 2003].

Mossi et al., 2012, aplicaram os modelos de gás cinza, WSGG e CW para cálculo da transferência de calor radiativa em meio participante composto por misturas de gases e fuligem em uma geometria unidimensional, comparando os resultados com soluções LBL. Os

autores afirmaram que os modelos de gás cinza e WSGG foram os que forneceram os melhores resultados nas situações em que a radiação térmica era dominada pela fuligem, enquanto o modelo CW fornecia os melhores resultados para baixas concentrações de fuligem.

Bressloff, 1999, investigou uma situação semelhante, e concluiu que o modelo WSGG fornecia bons resultados, mesmo para baixas quantidades de fuligem.

Demarco et al., 2011, avaliaram alguns modelos espectrais (SNB, FSCK, SLW e WSGG) para misturas de gases e fuligem em geometrias unidimensionais e bidimensionais. Os autores afirmaram que o modelo WSGG foi muito eficiente do ponto de vista computacional (1:255 em relação ao SNB, utilizado como *benchmark*) e fornece bons resultados para as frações volumétricas de fuligem usualmente encontradas em chamas de metano, apesar de levar a discrepâncias significativas com altas cargas de fuligem.

Cassol, 2013, comparou os resultados obtidos com os modelos GC, WSGG, SLW e CW em relação a solução *benchmark* (LBL), em geometria unidimensional, para meios não-isotérmicos e não-homogêneos, compostos por gases e fuligem, e mostrou que o modelo WSGG foi o que forneceu os melhores resultados, incluindo a situação em que a fração volumétrica de fuligem era de 10^{-7} , quantidade típica para chamas de metano-ar.

Na presente pesquisa, o coeficiente de absorção é obtido através da solução *benchmark* LBL e do modelo WSGG, considerando a mistura de gases e fuligem, produtos da combustão de metano-ar na câmara de combustão cilíndrica em estudo.

O modelo WSGG será empregado no cálculo do campo de radiação na chama de maneira acoplada aos cálculos do escoamento reativo, enquanto a solução *benchmark* LBL do campo de radiação será obtida posteriormente considerando campos fixos de temperatura e concentrações de espécies gasosas e fuligem (cálculo desacoplado radiação-CFD), permitindo assim uma avaliação quantitativa do erro no cálculo do campo de radiação devido ao emprego do modelo WSGG.

A solução LBL e o modelo WSGG serão discutidos a seguir para inclusão da radiação da fuligem.

Experimentos demonstraram que a variação do coeficiente de absorção da fuligem em relação ao número de onda pode ser aproximada por uma relação linear [Siegel e Howell, 2002; Modest, 1993; Hottel e Sarofim, 1967]:

$$\kappa_{\eta,s} = \beta f_v \eta \quad (3.52)$$

onde f_v é a fração volumétrica de fuligem e β é uma constante do modelo, considerada neste trabalho igual a 4,1 [Cassol et al., 2014; Yagi e Iino, 1961]. Siegel e Howell, 2002, apresentam diferentes valores de β conforme o combustível: 6,3 para óleo combustível, 4,9 para propano, 4,0 para acetileno, e 3,7 a 7,5 para carvão. A Eq. (3.52) mostra que a dependência do coeficiente de absorção da fuligem em relação ao número de onda é muito menos complexa do que aquele comportamento mostrado na Fig. 3.7. Assim, para a solução LBL, o coeficiente de absorção da mistura de gases e fuligem deverá ser o somatório das Equações (3.42) e (3.52).

No modelo WSGG, para uma mistura de gases e fuligem, um gás cinza adicional com coeficiente de absorção nulo ($\kappa_{g,0} = 0$) deve ser considerado, correspondendo às janelas transparentes de vapor de água e dióxido de carbono. Seu coeficiente de ponderação é calculado como $a_{g,0} = 1 - \sum_{j=1}^{N_G} a_{g,j}$. No caso de misturas puras de gases, as janelas transparentes não contribuem para o processo, mas em uma mistura de gases e fuligem deve-se considerar a emissão e a absorção da fuligem nas regiões espectrais correspondentes.

Os coeficientes do modelo WSGG para a fuligem estão apresentados na Tab. 3.4. Observa-se que o subscrito s refere-se à fuligem, assim como anteriormente foi apresentado o subscrito g para os gases. O coeficiente de absorção da fuligem é obtido pelo produto do coeficiente do modelo $\kappa_{s,n,fv}$ presente na Tab. 3.4 pela fração volumétrica de fuligem e pela constante β , e o coeficiente de ponderação da fuligem é obtido de maneira análoga à Eq. (3.44), com $j = n$. Assim, o coeficiente de absorção para a mistura de gases e fuligem é obtido através de todas as combinações possíveis de coeficientes de absorção dos gases e fuligem nas Tabelas 3.2 e 3.4,

$$\kappa_j = \kappa_{g,m} + \kappa_{s,n} \quad (3.53)$$

Os coeficientes de ponderação para a mistura são definidos como:

$$a_j = a_{m,n} = a_{g,m} a_{s,n} \quad (3.54)$$

onde a dimensão de j é $m \times n$. Deve-se observar ainda que o subíndice m acima representa o subíndice j da Tab. 3.2, uma vez que com a inclusão da fuligem, agora o subíndice j é usado para descrever a mistura de gás e fuligem, mantendo a ETR, Eq. (3.45), inalterada.

Tabela 3.4 - Coeficientes do modelo WSGG para fuligem [Cassol, 2013].

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

3.6 Interações Turbulência-Radiação

Turbulência e radiação são fenômenos físicos de alta complexidade mesmo quando analisados de forma independente. Em escoamentos reativos turbulentos, porém, os campos de concentração de espécies e de temperatura podem experimentar grandes flutuações, gerando variações no campo radiativo. Desta maneira, neste tipo de escoamento não é possível tratar estes fenômenos de forma independente, sendo necessário tratá-los de maneira relacionada, surgindo as chamadas interações turbulência-radiação (TRI – do inglês: *Turbulence-Radiation Interactions*).

O primeiro estudo teórico sobre as interações TRI [Foster, 1969] já mostrava que as propriedades radiativas de uma chama turbulenta estariam incorretas se as flutuações turbulentas fossem negligenciadas nos cálculos, especialmente para meios opticamente espessos, sendo estes resultados confirmados experimentalmente [Amin e Foster, 1973; Tan e Foster, 1978]. Em relação ao cálculo teórico da energia radiativa, Becker, 1975, estimou que esta energia variasse em até 500% em relação ao seu valor médio em uma chama turbulenta.

Já o primeiro cálculo realizado numericamente sobre as interações TRI, apresentado em Germano, 1978, baseou-se na hipótese de que as flutuações de temperatura e concentrações de espécies eram randômicas e que o meio participante era cinza. Em seguida, Kabashnikov e Kmit, 1979, estudaram os efeitos combinados das flutuações do coeficiente de absorção e da temperatura sobre a radiação e introduziram a hipótese da aproximação da flutuação opticamente fina (OTFA – do inglês: *Optically Thin Fluctuation Approximation*), que assume que o livre caminho médio da radiação é muito maior do que a escala integral do escoamento turbulento.

Assim, conforme destaca Coelho, 2007, estudos teóricos, experimentais e numéricos realizados até o ano de 1980 já haviam mostrado que existe uma dependência entre turbulência e radiação, porém o conhecimento sobre o comportamento físico destas interações ainda era limitado, uma vez que eram utilizadas grandes simplificações nas análises e os dados experimentais eram insuficientes. Desde então, esforços significativos foram realizados com o objetivo de melhorar o conhecimento sobre o comportamento físico das interações TRI e de desenvolver procedimentos numéricos para considerá-las nas simulações de escoamentos reativos. Alguns destes estudos serão apresentados a seguir, os quais estão, de alguma maneira, relacionados ao objetivo do presente trabalho, enquanto revisões mais completas (abordando os diferentes temas desta imensa área de pesquisa denominada interações TRI) podem ser encontradas em Modest, 2005, Coelho, 2007, e Coelho, 2012.

Os cálculos numéricos realizados para analisar as interações TRI podem ser desacoplados ou acoplados. Cálculos desacoplados consideram distribuições de temperatura e concentração de espécies como dados de entrada, ou seja, estas distribuições são assumidas, calculadas anteriormente com um código de dinâmica de fluidos computacional (CFD – do inglês: *Computational Fluid Dynamics*), ou obtidas de dados experimentais. Em muitos casos, calcula-se somente a radiação ao longo de uma linha (radiação entre duas placas planas infinitas – problema unidimensional). Os cálculos acoplados consideram simultaneamente todos os mecanismos e modelagens do escoamento, tais como turbulência, transferência de calor e combustão, sendo então extremamente mais complexos do que os primeiros.

Hall e Vranos, 1994, investigaram as interações TRI em uma chama difusiva de CH_4 - H_2 , utilizando um código CFD para fornecer os dados de entrada necessários para resolver a ETR temporal média usando a hipótese OTFA e um modelo de propriedades radiativas de banda larga. Naquele estudo, foram realizados cálculos unidimensionais para algumas posições a partir da saída do queimador considerando somente a influência da radiação da espécie H_2O , pois a concentração de CO_2 era muito menor do que aquela de H_2O para a chama em estudo. Os resultados foram comparados com aqueles obtidos usando um método estocástico e concordaram de forma satisfatória.

Krebs et al., 1994, usaram a hipótese OTFA para simular a intensidade de radiação de CO_2 ao longo de uma linha em uma dada faixa espectral, obtendo os dados de entrada para os cálculos de transferência de calor radiativa de um código CFD, e então comparando os resultados das simulações com dados experimentais. Apesar dos dados experimentais não estarem completos para as flutuações de temperatura e de concentrações, os autores fizeram

comparações qualitativas e concluíram que a intensidade de radiação espectral temporal média calculada era maior quando as interações TRI foram consideradas, observando que este comportamento se deve a não-linearidade entre temperatura e coeficiente de absorção de CO₂.

Em um trabalho posterior Krebs et al., 1996, reportaram o mesmo tipo de comparação, porém aplicada a uma chama difusiva turbulenta de propano-ar, e usando dados de entrada obtidos experimentalmente. Naquele estudo os autores realizaram cálculos considerando diferentes abordagens para as interações TRI: desprezando-as, considerando-as somente com flutuações de temperatura, e considerando-as com ambas as flutuações de temperatura e de concentração de espécies (assumindo que as flutuações de concentrações são correlacionadas com as flutuações de temperatura). Os resultados mostraram que predições precisas da transferência radiativa na zona de reação exigem que ambas as flutuações de temperatura e de concentrações sejam levadas em conta.

A validação das predições que consideram a hipótese OTFA pode ser realizada por comparação com dados experimentais ou por comparação com o cálculo exato da ETR. Coelho, 2002 e 2004, avaliou a precisão da hipótese OTFA pela comparação das predições baseadas nesta aproximação em relação à solução exata da ETR calculada usando um método estocástico, utilizando os dados disponíveis (campos de temperatura e concentrações de espécies) da chama Sandia D [Barlow e Frank, 1998].

Em Coelho, 2002, a intensidade de radiação total média foi computada usando o modelo SLW para avaliar as propriedades radiativas do meio participante e foram utilizadas quatro abordagens para o cálculo da ETR, sendo uma delas a solução exata, e outras três empregando a OTFA: (i) solução exata usada como referencial (método estocástico), (ii) modelagem considerando totalmente as interações TRI (autocorrelação do coeficiente de absorção, correlação entre coeficiente de absorção e temperatura, autocorrelação de temperatura), (iii) modelagem considerando somente a autocorrelação de temperatura na formulação das interações TRI, e (iv) desprezando as interações TRI. Os resultados apresentaram boa concordância somente entre a modelagem completa das interações TRI e a simulação estocástica. Quando as interações TRI foram consideradas somente pela influência das flutuações de temperatura os resultados não foram considerados satisfatórios e, no caso de desprezar as interações TRI, os resultados foram ainda piores.

Uma análise semelhante foi realizada em Coelho, 2004, calculando a intensidade de radiação total média para linhas (unidimensionais) e comparando os resultados das mesmas quatro abordagens de cálculo das interações TRI, porém as propriedades radiativas do meio

foram calculadas usando o modelo SNBCK. Os resultados seguiram a mesma tendência daqueles apresentados em Coelho, 2002. Estes resultados estão ligeiramente diferentes dos resultados apresentados em Coelho et al., 2003, uma vez que neste último a diferença entre as abordagens completa (caso *(ii)*) e parcial (caso *(iii)*) foi um pouco menor.

O primeiro trabalho realizando cálculos acoplados de transferência de calor radiativa em escoamentos reativos considerando interações TRI foi reportado em Song e Viskanta, 1987, no qual os autores investigaram uma chama turbulenta de metano pré-misturado em ar dentro de uma câmara de combustão bidimensional, assumindo funções para as propriedades dos gases para realizarem o estudo das interações TRI. Naquele trabalho inicial concluiu-se que a influência das interações TRI sobre as propriedades do escoamento dentro da câmara de combustão estudada poderia ser desprezada, devido ao pequeno volume da chama comparado ao volume total da câmara. Entretanto, neste mesmo estudo os autores realizaram cálculos paramétricos e verificaram que os efeitos das interações TRI se tornariam significativos se o tamanho da chama fosse da mesma escala de grandeza do volume da câmara de combustão.

O método denominado *composition probability density function (composition PDF)*, no qual as concentrações das espécies e a temperatura são tratadas como variáveis estocásticas, foi usado em Li e Modest, 2002a, para estudar os efeitos das interações TRI em escoamentos reativos que incluem radiação térmica. Os autores afirmaram que este método é capaz de tratar as interações TRI de forma rigorosa, onde muitos termos não-fechados resultantes do processo de médias de Reynolds na equação ETR podem ser calculados de forma exata, e os outros podem ser modelados usando a hipótese OTFA. Os autores aplicaram tal metodologia em um combustor cilíndrico com chama difusiva de metano-ar, considerando reação química instantânea, coordenadas cilíndricas axissimétricas, e propriedades radiativas dos gases através do modelo FSCK. Os cálculos indicaram que ocorria aumento dos fluxos radiativos nas paredes como um resultado das interações TRI, e ainda, que a desconsideração das interações TRI conduzia a valores subestimados para a transferência de calor por radiação, fazendo com que os níveis de temperatura dentro da câmara fossem sobreestimados. No mesmo trabalho, Li e Modest, 2002a, investigaram a importância dos diferentes termos TRI (a saber: *(i)* autocorrelação do coeficiente de absorção, *(ii)* autocorrelação de temperatura ou da função de Planck, *(iii)* correlação entre o coeficiente de absorção e a função de Planck, *(iv)* todas correlações anteriores juntas) utilizando campos convergidos de composição (concentrações de espécies e temperatura). Embora a não-linearidade da função de Planck com a temperatura seja a mais severa comparando com as outras funções, a consideração

somente da autocorrelação de temperatura não se mostrou suficiente, sendo que os resultados indicaram que a correlação entre o coeficiente de absorção e a função de Planck é a mais importante.

Outra aplicação do método *composition* PDF foi apresentada por Li e Modest, 2002b, com o objetivo de verificar se as interações TRI seriam importantes ou não em chamas turbulentas e, então, caso fossem, quais seriam as principais correlações que deveriam ser consideradas nas simulações. Para tal, os autores utilizaram as condições da chama Sandia D, a qual consiste em uma chama de metano-ar amplamente estudada na literatura e com dados experimentais detalhados, e ainda aplicaram fatores de multiplicação nesta chama para poderem simular chamas com espessuras ópticas maiores (as espessuras ópticas estudadas variaram entre 0,237 e 0,948). As demais características da simulação são as mesmas de Li e Modest, 2002a. Os resultados apresentaram a mesma tendência do trabalho anterior [Li e Modest, 2002a], porém observou-se que tais comportamentos foram mais intensos nas chamas de maior espessura óptica.

Uma simulação numérica da chama Sandia D foi realizada por Coelho et al., 2003, usando para fechamento da turbulência o modelo de transporte das tensões de Reynolds (RSM) e o modelo de combustão *steady flamelet laminar*. O objetivo do trabalho era mostrar e comparar os efeitos de diferentes abordagens para o cálculo da transferência de calor por radiação e para o cálculo das interações TRI. A OTFA e o método de ordenadas discretas foram usados, tratando o meio tanto como cinza, quanto como não cinza, usando o modelo SLW. A influência das interações TRI sobre a transferência de calor radiativa foi investigada considerando-as de forma parcial, através somente da autocorrelação de temperatura (função de Planck) ou de forma completa, considerando ambos os termos de autocorrelação do coeficiente de absorção e correlação entre coeficiente de absorção e função de Planck. A partir da análise realizada os autores concluíram que a natureza espectral da radiação deve ser considerada para obter uma predição precisa da transferência de calor por radiação. Embora os resultados da transferência de calor radiativa tenham concordado com os dados experimentais, os campos de temperatura e de concentração de espécies foram sobreestimados, por isso os autores fizeram uma investigação realizando cálculos radiativos adicionais baseados em dados experimentais, com o objetivo de isolar o efeito deste mecanismo, os quais confirmaram as tendências observadas nos cálculos acoplados de radiação-CFD. Ainda, a interação TRI aumentou a transferência radiativa por um fator de aproximadamente 30% para chama estudada, independente da consideração de interação

parcial ou completa.

Tessé et al., 2004, calcularam a transferência de calor por radiação com o objetivo de estudar as interações TRI em uma chama em jato turbulento difusivo de etileno-ar usando um método de Monte Carlo e o modelo k -correlacionado. Os autores utilizaram uma metodologia RANS com o modelo k - ε para a turbulência e um método PDF para a combustão. Na chama considerada, o efeito das interações TRI foi um aumento de aproximadamente 30% na taxa líquida de transferência radiativa.

A pesquisa de Snegirev, 2004, teve como foco a incorporação de um método estatístico (Monte Carlo) para transferência de calor radiativa na modelagem de chamas difusivas turbulentas. Os autores consideraram um mecanismo de cinética química de combustão com três etapas, incluindo fuligem, sendo as taxas de reação calculadas utilizando o modelo EBU. As equações de transporte foram resolvidas na forma média de Favre, utilizando para fechamento o modelo k - ε padrão. O comportamento das propriedades radiativas da mistura gás-fuligem foi tratado tanto como cinza ou como não cinza (usando o modelo WSGG), sendo que a comparação dos fluxos de calor radiativos calculados indicou a aplicabilidade do modelo de meio cinza nos casos com altas concentrações de fuligem. O autor ainda considerou o efeito das interações TRI no cálculo da emissão de radiação (para a absorção, foi considerada a hipótese OTFA), permitindo a consideração da autocorrelação de temperatura e a correlação entre o coeficiente de absorção e a temperatura. Os resultados da modelagem das chamas mostraram boa concordância quando comparados com dados experimentais (concentrações de espécies gasosas, temperatura e suas flutuações turbulentas, velocidade e suas flutuações turbulentas, e fluxos de calor radiativos), e a importância de considerar as interações TRI foi evidenciada através da melhoria dos resultados obtidos para a fração radiativa total, a qual também possuía valores experimentais para usar nas comparações.

A maioria dos trabalhos que estudam as interações TRI está baseada na hipótese OTFA, a qual, na prática, considera que as flutuações do coeficiente de absorção não são correlacionadas com as flutuações da intensidade de radiação. Modest e Mehta, 2006, propuseram um modelo para a correlação entre as flutuações do coeficiente de absorção e as flutuações da intensidade de radiação (denominada na literatura como “absorção TRI”), o qual será importante somente se os vórtices turbulentos forem opticamente espessos. Os resultados mostraram que a absorção TRI é muito importante na região de interface da chama em regiões espectrais opticamente espessas, embora a contribuição total à transferência de calor radiativa

global possa ser pequena para gases não-cinza com coeficientes de absorção relativamente baixos na maior parte do espectro. Entretanto, existe uma faixa de espessuras ópticas intermediárias, onde os vórtices turbulentos não são nem opticamente finos, nem opticamente espessos, na qual nem a OTFA nem o modelo proposto seria inteiramente satisfatório, porém nenhum outro modelo está disponível atualmente [Coelho, 2007].

Estudos numéricos foram apresentados em Habibi et al., 2007a e 2007b, para diferentes cenários das interações TRI em simulações RANS da chama difusiva não-luminosa Sydney HM1 e da chama Sandia D, modelando a turbulência pelo modelo RSM e a cinética química através de um mecanismo reduzido com modelo *steady flamelet laminar*, considerando a aproximação de escalar conservado com função PDF assumida para a interação entre turbulência e cinética química. Neste trabalho, foi considerado o método de ordenadas discretas em combinação com o modelo WSGG para solução da ETR. Os cenários das correlações das interações TRI que foram analisados são: desprezando as interações TRI, considerando somente a autocorrelação do coeficiente de absorção, considerando somente a autocorrelação de temperatura, considerando a autocorrelação do coeficiente de absorção e a autocorrelação de temperatura (sem considerar a correlação cruzada entre elas), considerando a correlação cruzada entre o coeficiente de absorção e a temperatura. Os autores demonstraram que a radiação não afeta a estrutura da chama, no sentido de que os campos de velocidades, temperaturas e concentrações de espécies são muito pouco afetados mesmo com a inclusão das interações TRI, obtendo como efeito líquido de considerar as interações TRI a diminuição na temperatura média em regiões de alta temperatura, pois a emissão é o processo dominante nas chamas opticamente finas estudadas. Em relação aos diferentes cenários das interações TRI, este estudo mostrou que não é suficiente considerar somente a autocorrelação de temperatura, e que o efeito da correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a temperatura é o mais importante, corroborando com resultados de trabalhos anteriores [Li e Modest, 2002a e 2002b].

O método *composition PDF* combinado com um método *particle Monte Carlo* foi empregado em Wang et al., 2008, para investigar a transferência de calor radiativa em três chamas de metano-ar: a chama Sandia D, e outras duas chamas artificiais derivadas dela a partir da sua duplicação e quadruplicação, obtendo assim chamas de diferentes espessuras ópticas. Os autores afirmaram que esta metodologia é capaz de levar em conta ambos os termos “emissão TRI” (correlação das flutuações do coeficiente de absorção e da função de Planck) e “absorção TRI”. Os autores validaram a metodologia mostrando que o perfil de

temperatura média na linha de centro da chama Sandia D padrão concordava com seus dados experimentais. Um ponto importante apresentado neste trabalho diz respeito aos efeitos da radiação na chama, os quais se tornaram mais significativos conforme aumentava a espessura óptica, e ainda, o efeito da interação TRI tendia a aumentar o termo fonte radiativo em aproximadamente 30% em ambas as chamas, tanto para o caso de considerar a interação TRI por completo, como no caso de considerá-la parcialmente usando a OTFA, demonstrando assim que ambas as três chamas eram opticamente finas e que a hipótese OTFA era válida.

Poitou et al., 2012, apresentou um estudo detalhado da transferência de calor radiativa e LES para combustão turbulenta em uma chama de laboratório, o qual utilizou o método de ordenadas discretas para solução da ETR, o modelo SNB-FSCK para as propriedades radiativas do meio participante, e cinética química de dois passos para reação de propano-ar. Primeiramente, os autores mostraram que a radiação influenciou a estrutura da chama, por exemplo, aumentando os níveis de temperatura nos gases ainda não queimados (máximo em 100 K), e diminuindo estes níveis na região de pós-queima (máximo em -150 K), o que poderia ter um efeito significativo na predição de espécies secundárias poluentes ou fuligem, e ainda alterando as flutuações de temperatura em aproximadamente 8%. Outro estudo realizado naquele mesmo trabalho está relacionado às interações TRI. Os resultados mostraram que as interações TRI aumentaram a transferência de calor radiativa total em 7,4% e que em alguns pontos o termo fonte radiativo variou em 20%. A importância relativa de cada correlação foi discutida usando quatro tipos de correlações: autocorrelação do coeficiente de absorção, autocorrelação de temperatura, correlação entre o coeficiente de absorção e a temperatura, correlação entre o coeficiente de absorção e a intensidade radiativa (esta última é desprezada em trabalhos que consideram a hipótese OTFA), mostrando que, apesar de todas as correlações apresentarem algum efeito perceptível sobre os resultados, a autocorrelação de temperatura e a correlação entre o coeficiente de absorção e a temperatura são as mais importantes.

Na pesquisa apresentada em Gupta et al., 2013, foi aplicada uma modelagem LES juntamente com um modelo de transporte da função PDF para solução do escoamento com combustão, acoplados a um método de Monte Carlo para solução da ETR, utilizando resolução espectral linha-por-linha. Tal modelagem acoplada foi aplicada na chama Sandia D, assim como em outras três chamas construídas a partir dela, aplicando um fator de escala e uma correlação para inclusão de fuligem, criando assim chamas artificiais com efeitos radiativos que poderiam ser estudados, uma vez que a fração radiativa da chama Sandia D é

somente de aproximadamente 5%. Cabe salientar a grande complexidade da análise realizada, a qual apresentou um alto custo computacional, de aproximadamente 5000 horas para um mecanismo de reação global, e 10000 horas para um mecanismo de reação com dezesseis espécies (quarenta e uma etapas de reação). Os autores isolaram as diferentes contribuições das interações TRI, como as diversas correlações do termo emissão TRI, assim como do termo absorção TRI. Conforme reportado em outros trabalhos [Li e Modest, 2002a e 2002b; Habibi et al., 2007a e 2007b; Poitou et al, 2012], os resultados mostraram que os termos mais importantes são a correlação entre o coeficiente de absorção e a temperatura e a autocorrelação de temperatura. Ainda, foi encontrado que o termo absorção TRI é importante somente para meios opticamente espessos, concordando com os resultados de Modest e Mehta, 2006.

Uma análise teórica da influência da turbulência sobre a emissão de radiação em uma chama turbulenta difusiva de metano-ar foi realizada em Coelho, 2013. O modelo de combustão utilizado foi o *laminar flamelet* com um mecanismo detalhado para cinética química. Valores médios do coeficiente de absorção, intensidade de radiação de corpo negro, e emissão radiativa foram avaliados para diferentes níveis de turbulência. Os resultados mostraram que se o nível de turbulência for inferior a 30%, a influência da turbulência sobre o coeficiente de absorção é marginal. Foi encontrado ainda que a emissão de radiação média é subestimada se as flutuações turbulentas forem completamente ignoradas e sobreestimada se somente as flutuações de temperatura forem consideradas.

A equação da transferência radiativa, Eq. (3.35), é aplicável somente para quantidades instantâneas, as quais apresentam flutuações em um escoamento turbulento, enquanto que o modelo de turbulência empregado no presente trabalho fornece somente quantidades temporais médias. Considerando a forma espectralmente integrada da ETR, e fazendo a média no tempo, resulta em:

$$\frac{d\bar{I}}{dS} = -\bar{\kappa}I + \bar{\kappa}I_{CN} \quad (3.55)$$

A decomposição das variáveis (temperatura e concentrações das espécies) em componentes médias e flutuantes, seguida da realização de média no tempo revela diversos termos que requerem modelagem [Coelho, 2007]:

- Autocorrelação da temperatura, $\overline{T^4}$, ou valores médios relacionados que

dependem somente da temperatura, tal como $\overline{I_{CN}}$ e $\overline{I_{\eta,CN}}$.

- Autocorrelação do coeficiente de absorção, $\overline{\kappa}$, ou correlações similares que dependem somente das propriedades radiativas do meio, como $\overline{\kappa_j a_j}$.
- Correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a temperatura, $\overline{\kappa T^4}$, ou correlações análogas, por ex., $\overline{\kappa_j a_j I_{CN}}$.
- Correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a intensidade de radiação, $\overline{\kappa I}$, ou correlações análogas, por ex., $\overline{\kappa_j I_j}$.

A correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a intensidade de radiação, ou seja, o primeiro termo do lado direito da Eq. (3.55), é expresso como

$$\overline{\kappa I} = \overline{\kappa} \overline{I} + \overline{\kappa I'} \quad (3.56)$$

Muitos trabalhos desprezaram o segundo termo do lado direito da Eq. (3.56) baseados nos argumentos de Kabashnikov e Kmit, 1979.

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

Conforme Coelho, 2007, a hipótese OTFA geralmente não é válida para todo o espectro, particularmente no centro de linhas espectrais fortes. Porém, as zonas espectrais onde esta aproximação não se aplica não influenciam significativamente a intensidade de radiação total, sendo então justificável na maioria das aplicações de engenharia, com a possível exceção de chamas com alta concentração de fuligem, sendo que esta aproximação tem sido empregada em muitos trabalhos que tratam com interações TRI [Hall e Vranos, 1994; Krebs et al., 1994; Krebs et al., 1996; Coelho, 2002; Li e Modest, 2002a e 2002b; Snegirev, 2004; Coelho, 2004; Habibi et al., 2007a e 2007b; Wang et al., 2008; Poitou et al., 2012]. De acordo com esta aproximação, a Eq. (3.55) fica da seguinte forma:

$$\frac{d\bar{I}}{dS} = -\bar{\kappa}\bar{I} + \overline{\kappa T}_{CN} \quad (3.57)$$

No segundo termo do lado direito da Eq. (3.57), o qual é proporcional a $\overline{\kappa T^4}$, valores instantâneos de κ e T se correlacionam em um escoamento turbulento. No presente trabalho utiliza-se uma aproximação para este termo conforme descrito em Snegirev, 2004, a qual considera a correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a temperatura e a autocorrelação de temperatura. Estas duas correlações das interações TRI foram encontradas como sendo as mais importantes em escoamentos reativos [Li e Modest, 2002a e 2002b; Habibi et al., 2007a e 2007b; Poitou et al., 2012; Gupta et al., 2013]. A decomposição da temperatura e do coeficiente de absorção em componentes médio e flutuante, $T = \bar{T} + T'$, $\kappa = \bar{\kappa} + \kappa'$, seguido da realização de média no tempo leva a:

$$\overline{\kappa T^4} = \overline{(\bar{\kappa} + \kappa')(\bar{T} + T')^4} = \bar{\kappa} \cdot \bar{T}^4 \left(1 + \underbrace{6 \frac{\overline{T'^2}}{\bar{T}^2} + 4 \frac{\overline{T'^3}}{\bar{T}^3} + \frac{\overline{T'^4}}{\bar{T}^4}}_{\text{autocorrelação da temperatura}} + 4 \underbrace{\frac{\overline{\kappa' T'}}{\bar{\kappa} \cdot \bar{T}} + 6 \frac{\overline{\kappa' T'^2}}{\bar{\kappa} \cdot \bar{T}^2} + 4 \frac{\overline{\kappa' T'^3}}{\bar{\kappa} \cdot \bar{T}^3} + \frac{\overline{\kappa' T'^4}}{\bar{\kappa} \cdot \bar{T}^4}}_{\text{correlação coeficiente de absorção - temperatura}} \right) \quad (3.58)$$

onde a expressão entre parênteses do lado direito da igualdade admite considerar as flutuações turbulentas. Somente as correlações de ordens mais baixas, $\overline{T'^2}$ e $\overline{\kappa' T'}$, são consideradas, conduzindo a,

$$\overline{\kappa T^4} = \bar{\kappa} \cdot \bar{T}^4 \left(1 + 6 \frac{\overline{T'^2}}{\bar{T}^2} + 4 \frac{\overline{\kappa' T'}}{\bar{\kappa} \cdot \bar{T}} \right) \quad (3.59)$$

Os termos $\overline{T'^2}$ e $\overline{\kappa' T'}$ devem ser modelados expressando-os como funções dos parâmetros médios do escoamento. As flutuações das concentrações das espécies possuem um papel secundário sobre as interações TRI [Habibi et al., 2007b; Coelho et al., 2003]. Assim, desprezando as flutuações das concentrações das espécies para calcular $\overline{\kappa' T'}$ na Eq. (3.59), Snegirev, 2004, substituiu a dependência $\kappa(T) = \kappa(\bar{T} + T')$ por uma série de Taylor:

$$\kappa \approx \kappa(\bar{T}) + T' \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}} + \frac{T'^2}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}} + \dots \quad (3.60)$$

Usando a Eq. (3.60), obtém-se o valor médio, $\bar{\kappa}$, e a componente flutuante, $\kappa' = \kappa - \bar{\kappa}$. A média do produto, $\overline{\kappa T'}$, é então derivada como segue:

$$\overline{\kappa T'} \approx \overline{T'^2} \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}} + \frac{\overline{T'^3}}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}} + \dots \approx \overline{T'^2} \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}} \quad (3.61)$$

Desprezando termos de ordens superiores, Eq. (3.59) pode ser escrita como [Snegirev, 2004]:

$$\overline{\kappa T^4} = \bar{\kappa} \cdot \bar{T}^4 \left(1 + C_{TRI1} 6 \frac{\overline{T'^2}}{\bar{T}^2} + C_{TRI2} 4 \frac{\overline{T'^2}}{\bar{\kappa} \cdot \bar{T}} \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}} \right) \quad (3.62)$$

A Eq. (3.62) é usada como uma estimativa aproximada para $\overline{\kappa T^4}$ permitindo flutuações turbulentas de temperatura. As constantes do modelo, C_{TRI1} e C_{TRI2} são consideradas valendo 2,5 e 1,0, respectivamente, sendo que o valor da constante C_{TRI1} foi obtido a partir de ajustes na relação experimental entre $\overline{T^4}/\bar{T}^4$ e $\overline{T'^2}/\bar{T}^2$ apresentada por Burns, 1999, permitindo assim a consideração da autocorrelação de temperatura nesta formulação.

O último termo da Eq. (3.62), o qual possui a derivada do coeficiente de absorção em relação à temperatura, é calculado no presente trabalho com $\kappa_j a_j(T)$, no modelo WSGG, com a dependência de $a_j(T)$ dada pela Eq. (3.44), enquanto no modelo GC este termo é calculado com a Eq. (3.49).

Para avaliar $\overline{T'^2}$, necessário para resolver a Eq. (3.62), a equação de transporte para a variância da flutuação da temperatura é resolvida:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left(\overline{\rho u T'^2} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \overline{\rho v T'^2} \right) = \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial r} \right) + 2 \frac{\mu_t}{Pr_t} \left(\frac{\partial \overline{T}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{T}}{\partial r} \right)^2 - C_T \overline{\rho T'^2} \frac{\varepsilon}{k} \end{aligned} \quad (3.63)$$

onde $C_T = 2,0$ é a constante do modelo. A Eq. (3.63) deve ser resolvida juntamente com o conjunto de equações apresentadas no Cap. 2, conforme será discutido no Cap. 4 deste trabalho. Ainda, em Snegirev, 2004, a variância da flutuação da temperatura é considerada nula nas fronteiras (condição de contorno).

O tratamento das interações TRI descrito acima também foi adotado em Yadav et al., 2013, para o estudo numérico de uma chama turbulenta em escala laboratorial, enquanto Krishnamoorthy, 2010a e 2010b, adotou uma abordagem similar em uma chama do mesmo tipo, sendo que em ambos os trabalhos os resultados foram satisfatórios.

4 MÉTODOS NUMÉRICOS DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES GOVERNANTES

Os métodos numéricos utilizados no presente trabalho para resolver o conjunto de equações referentes ao processo de combustão turbulenta incluindo transferência de calor por radiação são apresentados neste capítulo. O método de volumes finitos [Versteeg e Malalasekera, 2007; Maliska, 2003; Ferziger e Perić, 1997; Patankar, 1980] é aplicado para integrar as equações da conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia cinética turbulenta e de sua dissipação, de espécies químicas, e de energia, Equações (2.2), (2.3), (2.4), (2.5), (2.6), (2.7), (2.13), e (2.24), respectivamente, assim como a Eq. (2.18) para fração mássica de fuligem, e ainda a equação de transporte para a variância da flutuação de temperatura, Eq. (3.63). Este capítulo também apresenta a abordagem numérica utilizada na solução da equação de transferência radiativa (Eq. 3.35), necessária para a determinação do termo fonte radiativo ($\overline{S_{rad}}$) presente na equação da conservação de energia.

4.1 Método de volumes finitos

A forma generalizada das equações de conservação, Equações (2.2), (2.3), (2.4), (2.5), (2.6), (2.7), (2.13), (2.18), (2.24), e (3.63), para uma variável genérica ϕ , em regime permanente e em coordenadas cilíndricas axissimétricas é dada por,

$$\frac{\partial}{\partial z}(\overline{\rho u \phi}) + \frac{\partial}{\partial r}(\overline{\rho v \phi}) = \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial z}\right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\left(r \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial r}\right) + \overline{S^{\phi}} \quad (4.1)$$

onde a variável genérica ϕ representa as diferentes variáveis do problema (entalpia, frações mássicas das espécies químicas gasosas e da fuligem, velocidades, energia cinética turbulenta e sua dissipação, variância da flutuação de temperatura). O termo Γ_{ϕ} é o coeficiente difusivo, o qual assume valores específicos para cada caso, assim como o termo fonte genérico médio, $\overline{S^{\phi}}$. A Tab. 4.1 apresenta os valores específicos de ϕ , Γ_{ϕ} , e $\overline{S^{\phi}}$ para cada caso.

A Fig. 4.1 mostra o esquema de um volume de controle genérico e seus vizinhos para a situação bidimensional, em coordenadas cilíndricas axissimétricas.

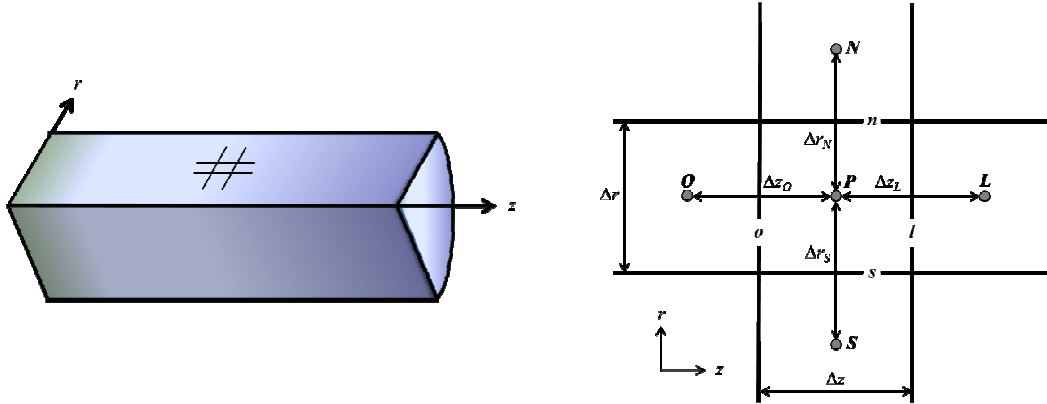


Figura 4.1 - Volume de controle genérico e seus vizinhos para situação bidimensional.

Definindo o fluxo total médio da variável genérica como:

$$\bar{J} = (\text{Fluxo advectivo de } \phi) + (\text{Fluxo difusivo de } \phi) \quad (4.2)$$

assim, os fluxos médios nas respectivas direções axial e radial são:

$$\bar{J}_z = \bar{\rho} \bar{u} \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \quad (4.3)$$

e

$$\bar{J}_r = \bar{\rho} \bar{v} \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial r} \quad (4.4)$$

Portanto, a Eq. (4.1) pode ser reescrita como,

$$\frac{\partial}{\partial z} (\bar{J}_z) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{J}_r) - \bar{S}^\phi = 0 \quad (4.5)$$

a qual pode ser integrada no volume de controle genérico (Fig. 4.1), obtendo

$$\int_s^n \int_l^o \left(\frac{\partial}{\partial z} (\bar{J}_z) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{J}_r) - \bar{S}^\phi \right) dz dr = 0 \quad (4.6)$$

Tabela 4.1 - Identificação da variável genérica, ϕ , coeficiente difusivo, Γ_ϕ , e termos fontes, $\overline{S^\phi}$, das equações de conservação que modelam o processo de combustão turbulenta.

Eq.	ϕ	Γ_ϕ	$\overline{S^\phi}$
(2.2)	1	0	0
(2.3)	\bar{u}	$(\mu + \mu_t)$	$-\frac{\partial p^*}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)$
(2.4)	\bar{v}	$(\mu + \mu_t)$	$-\frac{\partial p^*}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) - \frac{(\mu + \mu_t) \bar{v}}{r^2} + \frac{\rho \bar{w}^2}{r^2}$
(2.5)	$r \bar{w}$	$(\mu + \mu_t)$	$-2 \frac{(\mu + \mu_t)}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{w})$
(2.24)	\bar{h}	$\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right)$	$\overline{S_{rad}} + \sum_\alpha \left[\bar{h}_\alpha^0 + \int_{T_{ref}}^{\bar{T}} c_{p,\alpha} dT \right] \overline{R_\alpha}$
(2.6)	k	$\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right)$	$\left[\mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \right] - \bar{\rho} \varepsilon$
(2.7)	ε	$\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right)$	$C_{1,\varepsilon} \left[\mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \right] \frac{\varepsilon}{k} - C_{2,\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k}$
(2.13) $\alpha = CH_4$	$\overline{y_{CH_4}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{CH_4}}$
(2.13) $\alpha = O_2$	$\overline{y_{O_2}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{O_2}}$
(2.13) $\alpha = CO_2$	$\overline{y_{CO_2}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{CO_2}}$
(2.13) $\alpha = CO$	$\overline{y_{CO}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{CO}}$
(2.13) $\alpha = H_2O$	$\overline{y_{H_2O}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{H_2O}}$
(2.18)	$\overline{y_s}$	(μ_t / Sc_t)	$\overline{R_s}$
(3.63)	$\overline{T'^2}$	$\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right)$	$2 \frac{\mu_t}{Pr_t} \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{T}}{\partial r} \right)^2 - C_T \rho \overline{T'^2} \frac{\varepsilon}{k}$

sendo que na fronteira dos volumes adota-se a média harmônica para tratar os coeficientes difusivos das equações. Por conveniência, definem-se duas variáveis para representar o fluxo convectivo de massa por unidade de área, F , e a condutância difusiva, D , nas faces do volume de controle, as quais podem ser escritas da seguinte maneira para o volume de controle genérico da Fig. 4.1,

$$F_{z,l} = \rho u_l; \quad F_{z,o} = \rho u_o; \quad F_{r,n} = \rho v_n; \quad F_{r,s} = \rho v_s \quad (4.7)$$

$$D_{z,l} = \frac{\Gamma_l}{\Delta z_l}; \quad D_{z,o} = \frac{\Gamma_o}{\Delta z_o}; \quad D_{r,n} = \frac{\Gamma_n}{\Delta r_n}; \quad D_{r,s} = \frac{\Gamma_s}{\Delta r_s} \quad (4.8)$$

Um problema que surge com a discretização dos termos advectivos é o cálculo do valor da variável ϕ nas faces do volume de controle. No presente trabalho, o tratamento de tais termos advectivos é feito adotando-se o esquema de interpolação denominado *Power Law* [Patankar, 1980]. Apesar de existirem outros esquemas de interpolação, tais como o de diferenças centrais, o *upwind*, o híbrido e o QUICK (do inglês: *quadratic upwind interpolation for convective kinematics*), o esquema *Power Law* foi usado por apresentar um bom equilíbrio entre precisão dos resultados e exigência computacional, além de já estar implementado no algoritmo de propósitos gerais de Patankar, que foi usado no presente trabalho. Aplicando-se este esquema, obtém-se a seguinte equação algébrica como resultado da integral na Eq. (4.6):

$$a_P \phi_P = a_L \phi_L + a_O \phi_O + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (4.9)$$

na qual o termo b é dado por $S_C \Delta V$, proveniente da técnica de linearização do termo fonte apresentada por Patankar, 1980. Os coeficientes a_P , a_L , a_O , a_N e a_S são dados por:

$$\begin{aligned} a_L &= \left\{ D_{z,l} A \left(Pe_{z,l} \right) + \max[-F_{z,l}, 0] \right\} \Delta r \\ a_O &= \left\{ D_{z,o} A \left(Pe_{z,o} \right) + \max[F_{z,o}, 0] \right\} \Delta r \\ a_N &= \left\{ D_{r,n} A \left(Pe_{r,n} \right) + \max[-F_{r,n}, 0] \right\} \Delta z \\ a_S &= \left\{ D_{r,s} A \left(Pe_{r,s} \right) + \max[F_{r,s}, 0] \right\} \Delta z \\ a_P &= a_L + a_O + a_N + a_S - S_P \Delta V \end{aligned} \quad (4.10)$$

sendo o termo S_p também proveniente da técnica de linearização do termo fonte. Os termos $Pe_{z,b}$, $Pe_{z,o}$, $Pe_{r,n}$, $Pe_{r,s}$ do conjunto de Equações (4.10) são os números de Peclet, os quais são avaliados nas respectivas faces l , o , n e s do volume de controle, e são determinados por

$$Pe_{z,l} = \frac{F_{z,l}}{D_{z,l}}; Pe_{z,o} = \frac{F_{z,o}}{D_{z,o}}; Pe_{r,n} = \frac{F_{r,n}}{D_{r,n}}; Pe_{r,s} = \frac{F_{r,s}}{D_{r,s}} \quad (4.11)$$

Nos termos $A(|Pe|)$ das Equações (4.10) são inseridas as funções de interpolação que, no caso do esquema *Power Law*, podem ser escritas para qualquer valor de Pe como

$$\max[0, (1 - 0,1|Pe|)^5] \quad (4.12)$$

Acoplamento pressão-velocidade

O termo do gradiente de pressão constitui um problema complexo de ser resolvido, pois ele aparece nas equações de conservação da quantidade de movimento e não existe equação de transporte (ou de qualquer outro tipo) para a pressão. No caso de escoamentos incompressíveis, o acoplamento entre pressão e velocidade introduz uma restrição na solução do campo de escoamento: se o campo de pressão correto for aplicado nas equações de conservação de quantidade de movimento, o campo de velocidades resultante deverá satisfazer a equação da continuidade.

No presente trabalho, o problema do acoplamento pressão-velocidade é resolvido adotando uma estratégia de solução iterativa denominada algoritmo SIMPLE (do inglês: *Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*), apresentado originalmente em Patankar e Spalding, 1972.

Neste algoritmo, os fluxos convectivos de massa por unidade de área nas faces dos volumes de controle, F , são avaliados a partir de estimativas para os componentes da velocidade. Além disso, um campo de pressão estimado é usado para resolver as equações da conservação de quantidade de movimento, e uma equação de correção de pressão, deduzida da equação da continuidade, é resolvida para obter um campo de correção de pressão o qual é então utilizado para atualizar os campos de velocidade e de pressão. Conforme o algoritmo

avança, objetiva-se melhorar progressivamente estes campos estimados. O processo iterativo continua até a convergência dos campos de velocidade e de pressão.

Maiores detalhes sobre o algoritmo SIMPLE, assim como outros algoritmos de acoplamento pressão-velocidade, podem ser encontrados em Versteeg e Malalasekera, 2007, e em Patankar, 1980.

Solução do sistema de equações algébricas lineares

A discretização das equações governantes do processo de combustão turbulenta resulta em um sistema de equações algébricas lineares que precisa ser resolvido. A complexidade e o tamanho do conjunto de equações dependem das dimensões do problema, do número de volumes usados na malha e dos métodos utilizados para descrever os termos advectivos e o acoplamento pressão-velocidade.

Existem dois grupos de técnicas para resolver este tipo de equação: métodos diretos, como, por exemplo, a decomposição LU e a eliminação Gaussiana; e os métodos indiretos, conhecidos também por métodos iterativos, que são baseados na repetição de um algoritmo relativamente simples até que a convergência seja obtida. Os métodos iterativos mais empregados são: Jacobi, Gauss-Seidel, Sobre-Relaxações Sucessivas (SOR - do inglês: *Successive Over Relaxation*), algoritmo de Thomas (também conhecido por TDMA - do inglês: *Tri-Diagonal Matrix Algorithm*), *Modified Strongly Implicit* (MSI).

Neste trabalho, para a solução do sistema resultante de equações algébricas lineares, foi empregado o algoritmo TDMA, fazendo ainda o uso da técnica da correção em bloco (com exceção para a energia cinética turbulenta e sua dissipação), a qual contribui para a entrada das informações das condições de contorno para o interior do domínio [Patankar, 1980]. Em problemas bi e tridimensionais, o TDMA é aplicado linha por linha, percorrendo todo o domínio de cálculo. Ainda, a convergência frequentemente pode ser acelerada alternando as direções de varredura de modo que as informações das condições de contorno sejam incorporadas aos cálculos de maneira mais eficiente. Por exemplo, no caso bidimensional esta técnica é implementada através de quatro varreduras alternadas: norte-sul, sul-norte, leste-oeste, oeste-leste. Maiores detalhes sobre o algoritmo TDMA podem ser encontrados em Maliska, 2003, Versteeg e Malalasekera, 2007, e em Patankar, 1980.

Assim como o esquema de interpolação *Power Law*, os algoritmos SIMPLE e TDMA foram usados pelo fato de já estarem implementados no algoritmo de propósitos gerais de

Patankar, que foi usado no presente trabalho.

4.2 Métodos de solução da equação de transferência radiativa - ETR

Segundo Modest, 2003, os fenômenos que tornam complexa a solução de problemas de transferência de calor radiativa podem ser agrupados em quatro categorias:

- Geometria: pode ser uni, bi, ou tridimensional. Muitas investigações feitas até a atualidade consideraram geometrias unidimensionais, e a maioria destas lidam com o caso de placas planas paralelas.
- Campo de temperatura: a situação mais simples é considerada quando o perfil de temperatura dentro do meio participante for conhecido e isotérmico. Por outro lado, no cenário mais complexo, a transferência de calor radiativa é combinada com condução e/ou convecção, e o perfil de temperatura é desconhecido e não-uniforme.
- Espalhamento de radiação: a solução de um problema de radiação é simplificada se o meio participante não espalha a radiação. No entanto, se o espalhamento deve ser levado em conta, frequentemente considera-se espalhamento isotrópico (poucas investigações lidaram com o caso de espalhamento anisotrópico).
- Propriedades radiativas: a maioria dos meios participantes apresenta propriedades radiativas com comportamento não-cinza (dependência espectral), e que dependem também da temperatura e da concentração das espécies.

Atualmente, a maior parte dos trabalhos sobre transferência de calor radiativa aplica um dos seguintes métodos para solução da ETR: método de harmônicas esféricas, ou uma variação dele; método de ordenadas discretas (DOM - do inglês: *Discrete Ordinates Method*); método das zonas; método de Monte Carlo; e método de transferência discreta (DTRM - do inglês: *Discrete Transfer Radiation Model*). Ao contrário dos métodos de harmônicas esféricas e de ordenadas discretas, o método das zonas faz aproximações espaciais, ao invés de direcionais, fazendo subdivisões da cavidade em subvolumes finitos isotérmicos. Por outro lado, o método de Monte Carlo é um método estatístico, no qual o histórico dos feixes de fótons é traçado conforme eles percorrem a cavidade. O método de transferência discreta combina características dos métodos de ordenadas discretas, das zonas e Monte Carlo [Modest, 2003].

De um modo geral, não existe método que possa ser considerado o melhor para todos os problemas, e a escolha depende das características e exigências de cada um deles [Silva,

2005]. Para simulação da radiação em processos de combustão, Bidi et al., 2008, afirmam que o método de ordenadas discretas constitui a melhor escolha para solução da ETR, uma vez que com este método pode-se considerar os efeitos radiativos de gases não-cinza e os efeitos de espalhamento, e ele é válido para amplas faixas de espessuras ópticas. Além disso, o método de ordenadas discretas apresenta boa relação entre precisão dos resultados e exigência computacional [Coelho, 2007; Bidi et al., 2008], os quais configuram importantes fatores a serem considerados, principalmente em cálculos acoplados de transferência de calor radiativa com outros mecanismos de transporte (escoamento, combustão, etc.).

Esta seção apresenta o método de solução da ETR utilizado no presente trabalho, o método de ordenadas discretas. Logo após, outros métodos de solução daquela equação (método de harmônicas esféricas, método das zonas, método de Monte Carlo, método de transferência discreta) são brevemente apresentados.

4.2.1 Método de Ordenadas Discretas

O efeito da transferência de calor radiativa aparece na equação da conservação de energia, Eq. (2.24), como o negativo do divergente do fluxo de calor radiativo,

$$\overline{S_{rad}} = -\nabla \cdot \bar{q}_{rad} = \iint_{\omega\eta} (\kappa_{\eta} I_{\eta} - \kappa_{\eta} I_{CN\eta}) d\eta d\omega \quad (4.12)$$

onde η é o número de onda, $I_{CN\eta}$ é a intensidade espectral de corpo negro, I_{η} é a intensidade espectral, a qual é também função da posição e da direção. Para encontrar I_{η} deve-se resolver a equação de transferência radiativa (ETR), a qual, para um meio que emite, absorve e espalha, é dada por,

$$\frac{dI_{\eta}}{dS} = \kappa_{\eta}(S)I_{CN\eta}(S) - (\kappa_{\eta}(S) + \sigma_{s\eta}(S))I_{\eta}(S, \vec{s}) + \frac{\sigma_{s\eta}(S)}{4\pi} \int_{4\pi} I_{\eta}(S, \vec{s}') \Phi_{\eta}(S, \vec{s}, \vec{s}') d\omega' \quad (4.13)$$

sujeita a seguinte condição de contorno,

$$I_{\eta}(S_w, \vec{s}) = \varepsilon_w I_{CN,\eta}(S_w) + \frac{1 - \varepsilon_w}{\pi} \int_{\vec{n} \cdot \vec{s}' < 0} I_{\eta}(S_w, \vec{s}') |\vec{n} \cdot \vec{s}'| d\omega' \quad (4.14)$$

considerando uma superfície difusa e cinza. Nas Equações (4.13) e (4.14), ε_w representa a emissividade da parede, S a posição, \vec{n} é um vetor na direção normal à parede, \vec{s} é a direção correspondente ao ângulo sólido $d\omega$, \vec{s}' é a direção correspondente ao ângulo sólido $d\omega'$ (descrito como $d\omega_i$ no Cap. 3).

No presente trabalho a Eq. (4.13) é resolvida usando o método de ordenadas discretas (DOM), inicialmente proposto em Chandrasekhar, 1960. Este método baseia-se em uma representação discreta da dependência direcional da intensidade radiativa, sendo assim, a solução para o problema de transporte radiativo é encontrada resolvendo a ETR para um conjunto de direções discretas cobrindo toda a faixa do ângulo sólido de 4π sr. A ETR é então escrita para cada ordenada direcional discreta e seus termos integrais são substituídos por quadraturas numéricas somadas para todas as direções discretas.

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

Paul e Paul, 2010, investigaram a transferência de calor radiativa em uma chama turbulenta de propano e ar sem pré-mistura dentro de uma câmara de combustão cilíndrica, avaliando várias ordens das quadraturas do método de ordenadas discretas, sendo encontrado que as aproximações S_4 , S_6 e S_8 concordaram bem entre si, enquanto a aproximação S_2 forneceu resultados insatisfatórios, discordando das demais aproximações de ordens mais elevadas. Harmandar e Selçuk, 2004, estudaram a transferência de calor por radiação em uma cavidade cilíndrica e encontraram que os métodos de discretização angular S_6 e S_8 forneceram resultados satisfatórios, sendo que o método S_6 exigiu 40% menos tempo computacional do que o método de ordem superior. Assim, utiliza-se no presente trabalho o método S_6 , no qual, para a geometria bidimensional ($d = 2$) considerada, são avaliadas $M = 24$ direções discretas [Modest, 2003; Kaplan et al., 1994; Menart, 2000].

Assim, no DOM a Eq. (4.13) é resolvida para um conjunto de M diferentes direções \vec{s}_m , $m = 1, 2, \dots, M$, e as integrais sobre a direção são substituídas por quadraturas numéricas, ou seja,

$$\int_{4\pi} f(\vec{s}) d\omega \cong \sum_{m=1}^M w_m f(\vec{s}_m) \quad (4.15)$$

onde w_m são os pesos das quadraturas associados com as direções \vec{s}_m . Assim, a Eq. (4.13) é aproximada por um conjunto de M equações,

$$\frac{dI_\eta(S, \vec{s}_m)}{dS} = \kappa_\eta(S) I_{CN\eta}(S) - (\kappa_\eta(S) + \sigma_{s\eta}(S)) I_\eta(S, \vec{s}_m) + \frac{\sigma_{s\eta}(S)}{4\pi} \sum_{m'=1}^M w_{m'} I_\eta(S, \vec{s}_m) \Phi_\eta(S, \vec{s}_m, \vec{s}_{m'}) \quad (4.16)$$

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

$$I_\eta(S_w, \vec{s}_m) = \varepsilon_w I_{CN\eta}(S_w) + \frac{1 - \varepsilon_w}{\pi} \sum_{\vec{n} \cdot \vec{s}_{m'} < 0} w_{m'} I_\eta(S_w, \vec{s}_{m'}) |\vec{n} \cdot \vec{s}_{m'}|; \quad \vec{n} \cdot \vec{s}_m > 0 \quad (4.17)$$

Uma vez que as intensidades tenham sido calculadas, as quantidades integradas direcionalmente podem ser determinadas. O fluxo de calor radiativo espectral, dentro do meio ou em uma superfície, é determinado como,

$$\vec{q}_{rad\eta}(S) = \int_{4\pi} I_\eta(S, \vec{s}) \vec{s} d\omega \cong \sum_{m=1}^M w_m I_{m\eta}(S) \vec{s}_m \quad (4.18)$$

Similarmente, o divergente do fluxo de calor radiativo é determinado como,

$$\nabla \cdot \vec{q}_{rad\eta} = \kappa_\eta \left(4\pi I_{CN\eta} - \int_{4\pi} I_\eta d\omega \right) = \kappa_\eta \left(4\pi I_{CN\eta} - \sum_{m=1}^M w_m I_{m\eta}(S) \right) \quad (4.19)$$

Para geometria cilíndrica axissimétrica, a ETR é escrita para cada direção ordenada individual, m , como

$$\frac{\mu_m}{r} \frac{\partial(r I_{m\eta})}{\partial r} + \xi_m \frac{\partial I_{m\eta}}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial(\zeta_m I_{m\eta})}{\partial \varphi} = \kappa_\eta I_{CN\eta} - K_\eta I_{m\eta} + \frac{\sigma_{s\eta}}{4\pi} \sum_{m'} w_{m'} \Phi_{m'm,\eta} I_{m'\eta} \quad (4.20)$$

em base espectral, ou, alternativamente como,

$$\frac{\mu_m}{r} \frac{\partial(rI_m)}{\partial r} + \xi_m \frac{\partial I_m}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial(\zeta_m I_m)}{\partial \varphi} = \kappa I_{CN} - KI_m + \frac{\sigma_s}{4\pi} \sum_{m'} w_{m'} \Phi_{m'm} I_{m'} \quad (4.21)$$

desprezando a dependência espectral, a qual foi devidamente discutida no Cap. 3 deste trabalho. Os valores de m e m' representam as direções de saída e de chegada, respectivamente, μ_m , ξ_m , ζ_m são os cossenos diretores de uma direção ordenada, e φ é o ângulo de revolução ao redor do eixo z . Os valores dos cossenos diretores para a aproximação S_6 para geometria bidimensional estão mostrados na Tab. 4.2, sendo o fator peso $w_m = 0,5236$ usado para todas as direções.

Tabela 4.2 - Cossenos diretores para a aproximação S_6 para geometria bidimensional.

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

Conforme mostrado na Fig. 4.2, os cossenos diretores de uma direção discreta \vec{s}_m , são μ_m , ξ_m , ζ_m , e satisfazem a identidade $\mu_m^2 + \xi_m^2 + \zeta_m^2 = 1$. A direção \vec{s}_m pode ser imaginada

como um ponto sobre a superfície de uma esfera unitária com a qual uma área superficial, w_m , está associada. Os w_m representam pesos das quadraturas angulares e satisfazem o requisito de que o seu somatório para todas as direções discretas equivale à área superficial da esfera unitária. Um total de M direções são escolhidas e as áreas angulares são medidas em unidades de 4π , tal que $\sum_{m=1}^M w_m = 1$. Na Fig. 4.2 estão também mostrados os ângulos ϕ e ψ , os quais são usados para localizar o vetor direcional unitário \vec{s}_m .

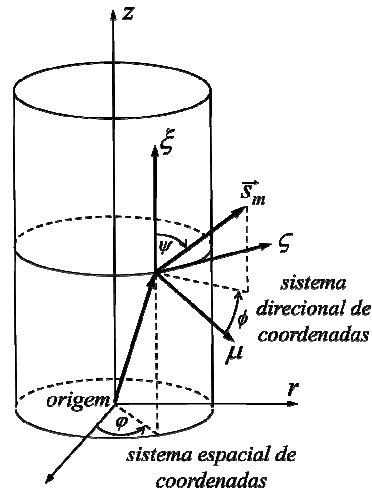


Figura 4.2 - Sistemas espacial e direcional de coordenadas para geometria cilíndrica (adaptado de Menart, 2000).

Integrando a Eq. (4.21) sobre um volume de controle arbitrário, conforme mostrado na Fig. 4.3, fornece:

$$\begin{aligned} \mu_m(A_n I_{mn} - A_s I_{ms}) + \xi_m(A_l I_{ml} - A_o I_{mo}) - (A_n - A_s) \frac{1}{w_m} (\alpha_{m+1/2} I_{m+1/2,p} - \alpha_{m-1/2} I_{m-1/2,p}) = \\ \dots \kappa I_{CNp} \Delta V - K I_{m,p} \Delta V + \frac{\sigma_s \Delta V}{4\pi} \sum_{m'} \Phi_{m'm} w_{m'} I_{m'p} \end{aligned} \quad (4.22)$$

onde A_n , A_s , A_l e A_o são as áreas correspondentes dos lados do volume de controle para as faces norte, sul, leste e oeste, respectivamente, ΔV é o volume do elemento de controle, e p é o ponto de interesse para o qual calcula-se a intensidade I_{mp} . Os termos I_{mn} , I_{ms} , I_{ml} e I_{mo} são as

intensidades para a direção individual m para os volumes norte, sul, leste e oeste, respectivamente (Fig. 4.3). O termo $I_{m-1/2,p}$ é a intensidade no ponto de interesse na direção angular $m-1/2$, onde a direção $m \pm 1/2$ define os limites da faixa angular da quadratura numérica w_m . O termo $(\alpha_{m+1/2}I_{m+1/2,p} - \alpha_{m-1/2}I_{m-1/2,p})$ na Eq. (4.22) aparece em consequência da técnica de diferenciação de Carlson e Lathrop, 1968, para o termo com derivada angular, $\partial/\partial\varphi$, na Eq. (4.21), e representa o fluxo de energia para fora e para dentro da faixa angular, onde o termo α é dado por,

$$\alpha_{m+1/2} = \alpha_{m-1/2} - w_m \mu_m \quad (4.23)$$

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

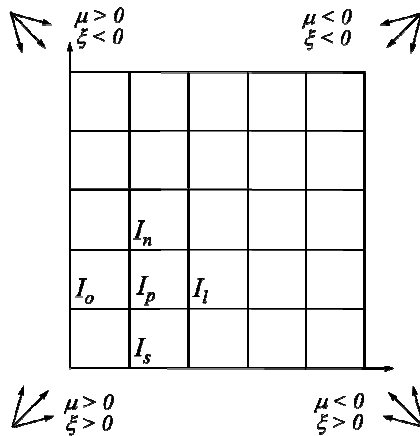


Figura 4.3 - Volume de controle e cossenos diretores para os cálculos DOM (adaptado de Kaplan et al., 1994).

Para resolver a Eq. (4.22) para I_{mp} , relações de interpolação são usadas para expressar valores de intensidade em pontos desconhecidos por valores de intensidade em pontos conhecidos. Por exemplo, para uma direção m que possua cossenos diretores positivos ($\mu_m > 0$, $\xi_m > 0$), eliminam-se as intensidades nos pontos desconhecidos I_{mn} , I_{ml} e $I_{m+1/2,p}$ expressando-as em termos de intensidades em pontos conhecidos I_{ms} , I_{mo} e $I_{m-1/2,p}$, usando

$$\begin{aligned}
I_{mp} &= \zeta I_{mn} + (1 - \zeta) I_{ms} \\
I_{mp} &= \zeta I_{ml} + (1 - \zeta) I_{mo} \\
I_{mp} &= \zeta I_{m+1/2,p} + (1 - \zeta) I_{m-1/2,p}
\end{aligned} \tag{4.24}$$

onde ζ é um fator de interpolação (considera-se $\zeta = 0,5$ no presente trabalho). Substituindo a Eq. (4.24) na Eq. (4.22) e rearranjando os termos, obtém-se uma expressão para I_{mp} em termos de variáveis conhecidas (para $\mu_m > 0$, $\xi_m > 0$),

$$I_{mp} = \frac{(\mu_m A_r I_{ms} + \xi_m A_z I_{mo} - [(A_n - A_s)/w_m] A_\alpha I_{m-1/2,p} + \zeta S \Delta V)}{(\mu_m A_n + \xi_m A_l - [(A_n - A_s)/w_m] \alpha_{m+1/2} + K \zeta \Delta V)} \tag{4.25}$$

onde

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

Uma vez que I_{mp} estiver calculado a partir da Eq. (4.25), as demais intensidades vizinhas ainda desconhecidas, I_{mn} , I_{ml} e $I_{p,m+1/2}$ são encontradas com as relações de interpolação, Eq. (4.24). Estas intensidades são então usadas como dados de entrada para o cálculo da intensidade para a próxima célula na direção correspondente, e a solução prossegue sucessivamente através da malha inteira para esta direção.

Para a aproximação S_6 , as intensidades de todos os pontos no domínio computacional são calculadas para cada uma das vinte de quatro direções consideradas. Primeiramente resolvem-se as intensidades para cada ponto da malha para cada direção com cossenos diretores negativos ($\mu_m < 0$, $\xi_m < 0$), em seguida resolvem-se para cada direção com cossenos diretores $\mu_m > 0$ e $\xi_m < 0$, então para cada uma das direções onde $\mu_m < 0$ e $\xi_m > 0$, e finalmente para cada uma das direções onde $\mu_m > 0$ e $\xi_m > 0$, conforme mostrado na Fig. 4.3. Para um conjunto positivo de cossenos diretores ($\mu_m > 0$, $\xi_m > 0$), o cálculo inicia no canto inferior esquerdo do domínio computacional e prossegue até o canto superior direito; as intensidades conhecidas estão nas faces sul e oeste, e relações de interpolação (como na Eq. (4.24)) são

usadas para eliminar a intensidade dos volumes norte e leste da Eq. (4.22) para calcular a intensidade no ponto de interesse, I_{mp} . Para os cossenos diretores $\mu_m < 0$ e $\xi_m > 0$, o cálculo procede do canto inferior direito até o canto superior esquerdo, e as intensidades conhecidas estão nas faces sul e leste. Para os cossenos diretores $\mu_m < 0$ e $\xi_m < 0$, o cálculo prossegue do canto superior direito até o canto inferior esquerdo, e as intensidades conhecidas estão nas faces norte e leste. Finalmente, para os cossenos diretores $\mu_m > 0$ e $\xi_m < 0$, o cálculo prossegue do canto superior esquerdo até o canto inferior direito, e as intensidades conhecidas estão nas faces norte e oeste. Maiores detalhes sobre o DOM podem ser encontrados em Modest, 2003, Kaplan et al., 1994, e Menart, 2000.

4.2.2 Outros métodos de solução da ETR

4.2.2.1 Método de harmônicas esféricas - Aproximações P-N

O método de harmônicas esféricas fornece uma maneira para obter uma solução aproximada da ETR pela sua transformação em um conjunto de equações diferenciais parciais. Este método foi primeiramente proposto por Jean, 1917, em seu trabalho sobre transferência radiativa em estrelas. A grande vantagem do método de harmônicas esféricas é a conversão da equação governante em equações diferenciais parciais relativamente simples [Modest, 2003]. A aproximação P-1 é a aproximação de ordem mais baixa do método de harmônicas esféricas, mas também a mais utilizada [Coelho, 2007]. Este método fornece bons resultados para meios opticamente espessos, porém deve-se ter cuidado ao aplicá-lo em meios opticamente finos [Modest, 2003; Fluent, 2009]. Ainda, ele permite a consideração da dependência espectral de propriedades radiativas e inclui o fenômeno do espalhamento [Silva, 2005; Fluent, 2009]. A aproximação P-1 tende a sobreestimar os fluxos radiativos de fontes (ou sumidouros) de calor localizados, como, por exemplo, os que ocorrem em processos de combustão [Bidi et al., 2008; Fluent, 2009].

4.2.2.2 Método das Zonas

Neste método a cavidade (não-isotérmica) é subdividida em um número finito de zonas de áreas superficiais (superfície da cavidade) e de volumes (de gás participante)

isotérmicos. Um balanço de energia é então realizado para a transferência radiativa entre quaisquer duas zonas, empregando fatores de troca previamente calculados. Este processo leva a um conjunto de equações para as temperaturas ou os fluxos de calor desconhecidos em cada zona. O método foi primeiramente desenvolvido por Hottel e Cohen, 1958, para um gás que absorve, emite e não espalha radiação, com coeficiente de absorção constante. Hottel e Sarofim, 1967, estenderam o método para lidar com coeficiente de absorção não-constante e não-cinza, assim como com meios que espalham isotropicamente [Modest, 2003].

Algumas limitações do método residem na dificuldade de tratar geometrias mais complexas do que cavidades cilíndricas e retangulares, na incorporação do fenômeno de espalhamento, na consideração da não-homogeneidade do meio participante, e na compatibilização da malha do método das zonas com a requerida para a solução dos termos difusivos e advectivos da equação da energia [Silva, 2005].

4.2.2.3 Método de Transferência Discreta de Radiação

Desenvolvido por Lockwood e Shah, 1981, o método de transferência discreta de radiação (DTRM) é similar ao método de ordenadas discretas, uma vez que o ângulo sólido é dividido em ordenadas discretas, e também ao método de Monte Carlo, uma vez que os raios de intensidade de radiação são traçados e acompanhados de uma superfície até outra superfície. Essencialmente, pontos nodais são estabelecidos na fronteira da cavidade, dos quais raios são enviados em direções predeterminadas. O raio é então traçado conforme ele atravessa através de volumes finitos internos ao meio, e esta interação é gravada (atenuação da intensidade de radiação do raio por deposição de energia no volume, ou aumento da intensidade do raio por emissão e espalhamento), até que ele colida com outra superfície [Modest, 2003].

As principais vantagens do DTRM são: modelo relativamente simples, pode-se aumentar a precisão aumentando o número de raios, se aplica para uma ampla faixa de espessuras ópticas [Fluent, 2009].

4.2.2.4 Método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo é baseado em conceitos probabilísticos para modelar eventos estocásticos, tais como emissão, espalhamento, reflexão e absorção de fótons, sendo o

fluxo de calor radiativo calculado a partir do comportamento médio de um grande número finito de feixes de fótons. Os caminhos dos feixes de fótons são traçados através do meio a partir de um ponto de emissão, na fronteira ou dentro do meio, até que aconteça a sua absorção na fronteira ou no meio. Os pontos de emissão, direções das trajetórias, e decisões tais como se um feixe de fótons que atinge uma superfície na fronteira será absorvido ou refletido, são obtidas de números aleatórios gerados a partir de funções PDF apropriadas [Coelho, 2007].

O método de Monte Carlo foi primeiramente aplicado em problemas de radiação térmica por Fleck, 1961a, 1961b, Howell e Perlmutter, 1964a, 1964b, e Perlmutter e Howell, 1964.

Segundo Modest, 2003, este método é melhor do que os métodos de diferenciação (DOM, P-N, etc.) para aplicações em geometrias de alta complexidade, propriedades radiativas que variam com a direção, quando os efeitos do espalhamento anisotrópico são importantes. Para problemas de baixa complexidade, este método apresenta uma formulação mais complexa do que os outros métodos, o que demanda um maior esforço computacional para solução, porém, este esforço aumenta pouco ao aumentar a complexidade do problema, diferente dos métodos de diferenciação, que podem se tornar impossíveis de resolvê-los para problemas muito complexos.

4.3 Detalhes da implementação

Para solução do problema de escoamento reativo no interior da câmara de combustão cilíndrica, partiu-se do algoritmo desenvolvido por Silva, 2005, o qual adaptou o algoritmo de propósitos gerais de Patankar para a realização da simulação numérica da câmara de combustão foco do presente trabalho, alterando as sub-rotinas de determinação das condições de contorno e propriedades termofísicas, além da adição dos termos fonte das equações de conservação. No presente estudo, algumas destas rotinas foram atualizadas, assim como a determinação dos termos fonte, em particular, o termo fonte de calor radiativo. Ainda, o código foi escrito e implementado em Fortran 90.

Uma vez que em Silva, 2005, o campo de radiação na câmara foi resolvido com o método das zonas, o qual possui algumas limitações como descrito anteriormente, no presente trabalho todas as sub-rotinas referentes ao cálculo do campo de radiação foram substituídas e então acopladas ao programa principal de Patankar, utilizando então o método de ordenadas

discretas, que permite o emprego de qualquer modelo espectral, inclusive o modelo LBL, assim como considerar a não-homogeneidade do meio participante e as interações TRI.

Nesta nova sub-rotina de cálculos de radiação, o termo fonte de calor radiativo, $\overline{S_{rad}}$, é calculado como o negativo do divergente do fluxo de calor radiativo, utilizando para isto o método de ordenadas discretas em coordenadas cilíndricas axissimétricas. Esta sub-rotina fornece como resultado um termo fonte de calor radiativo com unidades de $W \cdot m^{-3}$, compatível com os demais termos fonte da equação de energia implementada no programa principal. Para o cálculo deste termo foram necessários parâmetros geométricos da malha, e os campos de temperatura, de frações molares de H_2O e CO_2 , e de fração volumétrica de fuligem da iteração anterior. Ainda, o coeficiente de absorção dos gases participantes foi modelado pelos modelos WSGG e GC, e as interações TRI foram consideradas no cálculo do campo de radiação. O modelo LBL, considerado como *benchmark* devido a sua alta resolução espectral, foi empregado em cálculos desacoplados radiação-CFD (nos quais se utilizam campos prescritos de temperatura e frações molares das espécies gasosas e fuligem para o cálculo do campo de radiação), com o objetivo de avaliar quantitativamente os modelos WSGG e GC.

Todas as equações são resolvidas de forma acoplada a cada iteração executada pelo programa. São empregadas sub-relaxações devido à possibilidade de divergência na solução numérica. Os valores dos fatores de sub-relaxação usados na solução das equações de energia, de espécies químicas, de quantidade de movimento, de energia cinética turbulenta e de dissipação da energia cinética turbulenta foram de 0,1. Para o termo fonte de calor radiativo, a fim de evitar a divergência da solução, foi utilizado um fator de sub-relaxação de 0,01. Foi utilizado também um fator de sub-relaxação para a correção da pressão, para a massa específica, para o termo fonte de reação química e para a viscosidade turbulenta, também de 0,1. Os termos fontes destas equações de conservação foram, quando necessário, discretizados em diferenças finitas e implementados segundo a técnica de linearização apresentada por Patankar, 1980, sendo então inserido no termo b da Eq. (4.9) e no coeficiente a_P da Eq. (4.10).

O calor específico da mistura, usado na obtenção da temperatura, foi determinado conforme a Eq. (2.27). As correlações utilizadas para determinação do calor específico das espécies químicas ($c_{p,\omega}$) envolvidas na reação de combustão do metano foram obtidas em Turns, 2000. Estas equações são usadas para a determinação da temperatura e também para a determinação do termo fonte da equação da conservação de energia referente às reações

químicas, \overline{S}_{rea} , Eq. (2.28). Este termo fonte considera, além das entalpias de formação de cada espécie química, o calor sensível devido ao aumento de temperatura. Esta parcela referente ao aumento de temperatura é calculada pela integral presente na Eq. (2.28) entre os limites inferior e superior de temperatura, $\overline{T}_{ref} = 298,15$ K e $\overline{T} =$ temperatura local dos gases, respectivamente.

Para a determinação da temperatura utiliza-se a entalpia da mistura, Eq. (2.25), e o calor específico da mistura, Eq. (2.27), juntamente com as correlações de $c_{p,\alpha}$ obtidas em Turns, 2000. Sendo assim, com a magnitude da entalpia na iteração atual e o calor específico da mistura na iteração anterior, obtém-se a temperatura em cada volume de controle.

A determinação das taxas das reações químicas, \overline{R}_α , é feita através da solução das Equações (2.15), (2.16) e (2.17) para todas as espécies químicas envolvidas, escolhendo então o menor valor entre estes três, conforme discutido no Cap. 2. Este procedimento também é feito de forma explícita a cada iteração, até a convergência, sendo que a temperatura e as concentrações das espécies químicas usadas também são as da iteração anterior.

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

5 VERIFICAÇÃO E VALIDAÇÃO

As equações de conservação (massa, quantidade de movimento, energia, espécies químicas) para modelar os processos físicos que ocorrem no interior de uma câmara de combustão foram apresentadas no Cap. 2, considerando o modelo $k-\varepsilon$ padrão para modelagem da turbulência e o modelo E-A para modelagem da combustão, assim como a modelagem referente à formação de fuligem.

Completando a modelagem físico-matemática de tais processos físicos, no Cap. 3 foi apresentada a modelagem da transferência de calor por radiação, a qual emprega o método de ordenadas discretas (DOM) para a solução da ETR, os modelos WSGG, GC e LBL para a modelagem do coeficiente de absorção do meio participante que pode ser composto por gases e fuligem, e ainda a metodologia utilizada para consideração das interações TRI.

No presente capítulo é apresentado o problema físico no qual será investigada a radiação térmica e seus efeitos sobre o comportamento das variáveis influenciadas por ela. Desta forma, apresentam-se a geometria do domínio, as condições de contorno, as propriedades termofísicas das espécies químicas envolvidas, o estudo de convergência de malha, a análise do balanço de energia na câmara, a influência de variações nas condições turbulentas de entrada sobre os resultados, a verificação da importância das forças de empuxo, e ainda a análise de resultados obtidos com a presente modelagem em comparação com resultados da literatura.

5.1 O problema abordado

Utilizou-se a mesma câmara de combustão analisada por Magel et al., 1996a, 1996b, Nieckele et al., 2001, e Silva et al., 2007. Esta câmara de combustão foi usada como caso de teste no *First Workshop on Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces*, organizado pela ERCOFTAC (do inglês: *European Research Community on Flow Turbulence and Combustion*), em 1994 [Garréton e Simonin, 1994], para a qual foram apresentados dados experimentais de temperatura e concentração de espécies químicas para várias posições no interior da câmara. A geometria da câmara de combustão é cilíndrica, com comprimento de 1,7 m e diâmetro de 0,5 m, representada na Fig. 5.1.

Esta câmara de combustão é abastecida com gás natural (GN) através do bico injetor cilíndrico de um queimador situado na sua linha central. O queimador abastece a câmara de

combustão com as quantidades necessárias de ar e gás natural. Considera-se que a composição mássica do ar de entrada seja de 23% de oxigênio (O_2), 76% de nitrogênio (N_2) e 1% de vapor de água (H_2O). Assume-se o gás natural como sendo composto de 90% de metano (CH_4) e 10% de nitrogênio, conforme sugerido por Garréton e Simonin, 1994. Utilizou-se um excesso de combustível de 5%, resultando em uma vazão mássica de combustível de $0,01453 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$ com uma temperatura de 313,15 K, e em uma vazão mássica de ar de $0,1988 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$ com uma temperatura de 323,15 K.

O combustível entra na câmara de combustão através de um duto cilíndrico de 0,06 m de diâmetro, e o ar por um anel adjacente com 0,02 m de vão anular, externo a este duto. Para estas vazões, as velocidades de injeção foram de $7,23 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ e $36,29 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, para o combustível e para o ar, respectivamente.

O número de Reynolds médio entre as correntes de ar e de combustível na região de entrada da câmara vale 17925, caracterizando escoamento turbulento.

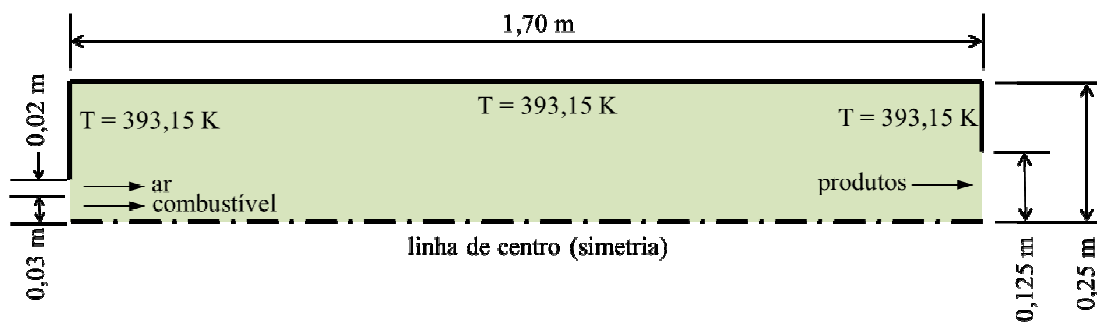


Figura 5.1 - Representação esquemática da câmara de combustão em estudo.

Considerando a axissimetria, assume-se o domínio de cálculo como sendo apenas uma fração angular representativa da câmara (1 rad). Embora uma das características fenomenológicas da turbulência seja a sua natureza tridimensional, a modelagem da turbulência tem sido realizada utilizando a geometria cilíndrica axissimétrica nas mais diversas áreas de pesquisa, incluindo trabalhos que estudam combustão turbulenta [*e.g.* Saqr et al., 2010, Silva et al., 2007, Li e Modest, 2002a, Li e Modest, 2002b, Nieckele et al., 2001, Pember et al., 1996, Magel et al., 1996a, Magel et al., 1996b].

Tanto o ventilador quanto os demais componentes externos à câmara de combustão não fazem parte do domínio de cálculo, mas são considerados indiretamente na solução, já

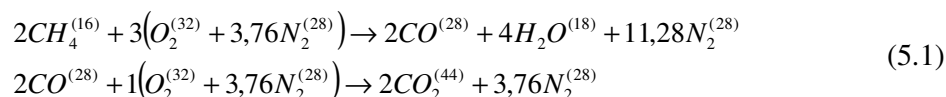
que fornecem as condições de entrada na câmara.

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

A potência nominal do queimador utilizado é de 600 kW.

As forças de empuxo são desprezadas uma vez que se considera que o escoamento seja governado principalmente pelas forças de inércia, em virtude das altas velocidades impostas pelo queimador. Na Seção 5.7 é apresentada uma análise sobre a importância das forças de empuxo na câmara de combustão.

Em relação à reação química, considera-se que o processo de combustão ocorra em duas etapas globais,



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

Assim, o problema é definido da seguinte maneira: dada a geometria da câmara, calcular a distribuição de temperatura e de concentrações de espécies, para fins de comparação com dados experimentais e numéricos reportados na literatura, assim como a obtenção de campos de radiação térmica no interior da câmara e sua influência sobre as demais propriedades do processo térmico. Em termos matemáticos, isto exige a solução das equações apresentadas nos Capítulos 2 e 3, para as quais é necessário definir as condições de contorno e as propriedades termofísicas do ar e do combustível, assim como dos produtos da combustão.

5.2 Condições de contorno

Nas paredes da câmara são impostas as condições de não-deslizamento e impermeabilidade, sendo a viscosidade nestas regiões determinada através de funções de parede acopladas ao modelo de turbulência $k - \varepsilon$ (conforme descrito no Cap. 2).

No eixo de simetria assume-se que a componente radial da velocidade é nula, assim como o gradiente de velocidade. Este procedimento também é adotado para a energia cinética turbulenta e sua dissipação, temperatura (entalpia) e concentrações de espécies.

A temperatura das paredes da câmara de combustão é prescrita constante e igual a 393,15 K, conforme Garréton e Simonin, 1994.

Na seção de entrada considerou-se escoamento uniforme na direção axial, e perfil de concentração também uniforme (combustível e ar). Ainda, considerou-se a energia cinética turbulenta como,

$$k = \frac{3}{2} (\bar{u}_{ent} IT)^2 \quad (5.2)$$

onde IT é a intensidade de turbulência (prescrita em 6% para a corrente de ar e em 10% para a de combustível) e \bar{u}_{ent} é a velocidade axial média na entrada. Para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta especificou-se,

$$\varepsilon = \frac{C_{\mu}^{\frac{3}{4}} k^{\frac{3}{2}}}{l} \quad (5.3)$$

onde l é o comprimento característico da escala de turbulência (prescrito como 0,04 m para a corrente de ar e como 0,03 m para a de combustível). Estes valores foram obtidos de Niecele et al., 2001, Silva et al., 2007 e Garréton e Simonin, 1994. Na Seção 5.6 é realizada uma análise da influência de variações nas condições turbulentas de entrada (intensidades de turbulência e comprimentos característicos das escalas de turbulência para a corrente de ar e de combustível) sobre os resultados da simulação.

Nas paredes da câmara assume-se valor nulo para a energia cinética turbulenta, e prescreve-se sua dissipação como,

$$\varepsilon = \frac{C_{\mu}^{\frac{3}{4}} k^{\frac{3}{2}}}{\Lambda y} \quad (5.4)$$

onde o valor de k é obtido do primeiro volume de controle interno da câmara.

Assume-se que na saída da câmara de combustão as distribuições de energia cinética turbulenta e de sua dissipação, as distribuições de temperatura e de concentrações de espécies, assim como a componente radial da velocidade sejam localmente parabólicas. Para determinar

a condição de contorno da velocidade axial \bar{u} na saída, o perfil de velocidades nesta posição foi corrigido por um fator de modo a conservar a massa e evitar contrafluxos [Silva, 2005]. Enquanto que as temperaturas nas paredes e na entrada foram prescritas, a temperatura na saída foi calculada como a temperatura média de mistura do escoamento na saída,

$$\bar{T}_{bulk} = \frac{\int_A \bar{\rho} \bar{u} c_p \bar{T} dA}{\int_A \bar{\rho} \bar{u} c_p dA} \quad (5.5)$$

onde \bar{T}_{bulk} é a temperatura da mistura, e c_p é o calor específico da mistura à pressão constante. Ainda, a variância da flutuação de temperatura foi considerada nula na entrada e nas paredes da câmara.

Para a solução da ETR, tanto as paredes da câmara, quanto as áreas de entrada e saída, foram modeladas como superfícies negras.

5.3 Propriedades termofísicas

Nesta seção são apresentadas as constantes e as propriedades termofísicas utilizadas na solução do problema.

Dentre as propriedades utilizadas, assume-se que a viscosidade dinâmica, a viscosidade cinemática e a difusividade sejam constantes e iguais as do nitrogênio, respectivamente com os seguintes valores: $\mu = 2,97 \times 10^{-5} \text{ N.s.m}^{-2}$, $\nu = 51,8 \times 10^{-6} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$, e $D = 2,88 \times 10^{-5} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$. Ainda, os números de Prandtl e de Schmidt turbulentos foram ambos considerados iguais a 0,9. Tais propriedades termofísicas foram obtidas em Nieckele et al., 2001, Silva, 2005, e Silva et al., 2007.

A Tab. 5.1 apresenta os valores das entalpias molares de formação padrão de cada espécie química.

Considerou-se que todas as propriedades termofísicas presentes no problema sejam mantidas constantes para cada substância, com exceção do calor específico da mistura de gases (CH_4 , O_2 , H_2O , CO_2 , CO e N_2) usado para pós-processamento da temperatura. O calor específico a pressão constante de cada espécie foi determinado utilizando as correlações apresentadas em Turns, 2000, sendo que o calor específico da mistura foi obtido a partir de

uma média ponderada pelas frações mássicas das espécies, conforme a Eq. (2.34).

Os parâmetros utilizados para determinação das taxas de reação pelo modelo de Arrhenius, calculadas pela Eq. (2.15), estão apresentados na Tab. 5.2, sendo as reações 1 e 2 aquelas representadas na Eq. (5.1). O mecanismo de reação da Eq. (5.1) e Tab. 5.2 foi empregado na literatura utilizada como referência para comparação e validação da modelagem do presente trabalho, o que será discutido na Seção 5.8. A energia de ativação da reação 1 foi ajustada para $2,3 \times 10^8 \text{ J} \cdot \text{kmol}^{-1}$ para que os resultados numéricos se aproximassem melhor dos resultados experimentais, sendo este ajuste aplicado somente aos cálculos apresentados no Cap. 6 do presente trabalho.

Tabela 5.1 - Entalpia molar de formação padrão a 298,15 K e 1 atm [Turns, 2000].

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

Tabela 5.2 - Parâmetros de cada reação para cálculo da taxa pelo modelo de Arrhenius [Turns, 2000; Nieckele et al., 2001; Silva, 2005; Silva et al., 2007].

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

Considera-se ainda, para ambos os casos, que o comportamento dos gases dentro da câmara de combustão apresente características de gás perfeito. Esta é uma boa aproximação, pois a câmara opera aproximadamente à pressão atmosférica [Spalding, 1979].

5.4 Estudo de convergência de malha

O estudo de convergência de malha tem como objetivo verificar a discretização necessária do domínio físico para obter resultados numéricos suficientemente independentes do grau de refinamento da malha.

A Tab. 5.3 apresenta os resultados obtidos para a fração radiativa (definida como a razão entre a integral de $\overline{S_{rad}}$ sobre todo o domínio computacional e o calor liberado na combustão), a temperatura máxima e as frações molares máximas de CO₂ e H₂O empregando diferentes graus de refinamento da malha. Uma vez que estas variáveis reúnem características dos processos de combustão, radiação e cinética química, elas foram escolhidas por serem variáveis-chave para as simulações, sendo então utilizadas para o estudo de convergência de malha.

Os resultados da Tab. 5.3 foram obtidos empregando cálculos acoplados entre escoamento, combustão e radiação, utilizando os coeficientes do modelo WSGG de Smith et al., 1982.

Tabela 5.3 - Fração radiativa, temperatura máxima e frações molares máximas de CO₂ e H₂O para diferentes malhas.

	Malha	f_{rad} [%]	T_{max} [K]	$x_{CO2,max}$	$x_{H2O,max}$
1	48×140	9,776	1799,56	0,09691	0,19784
2	24×70	9,769	1787,80	0,09608	0,19855
3	12×35	9,751	1744,18	0,11858	0,19346

Na Tab. 5.3 cada uma das malhas testadas está representada pelo número de volumes nas direções radial e axial, respectivamente, por exemplo, a malha 12×35 possui 12 volumes na direção radial e 35 volumes na direção axial. Deve-se observar que o estudo de convergência de malha aqui apresentado baseia-se na duplicação do número de volumes em cada direção (r e z), conforme pode ser verificado na Tab. 5.3. Ainda, realiza-se este estudo com a comparação de três malhas, sendo a malha identificada como “1” a mais refinada, “2” a malha intermediária, e “3” a malha mais grosseira. Esta nomenclatura para identificação das malhas está apresentada na Tab. 5.3.

No presente estudo emprega-se a metodologia de análise de convergência de malha proposta inicialmente por Roache, 1994, e atualizada em Celik et al., 2008, a qual será brevemente descrita a seguir.

Roache, 1994, propôs um índice de convergência de malha (GCI – do inglês: *Grid Convergence Index*) com o objetivo de reportar os resultados de estudos de convergência de malha de forma uniforme e ainda fornecer uma estimativa de erro relacionada com a convergência de malha da solução.

O GCI pode ser calculado usando dois níveis de malha, entretanto, três níveis são recomendados a fim de estimar a ordem de convergência e para verificar se os resultados estão dentro da faixa assintótica de convergência.

O GCI é uma estimativa do desvio percentual entre o resultado calculado e o valor assintótico que seria obtido com uma malha com resolução zero, ou seja, o GCI indica uma faixa de erro sobre o quanto distante a solução com uma determinada malha está do valor assintótico.

O GCI da malha mais refinada é definido como:

$$GCI_{12} = \frac{F_s |\varepsilon_{12}|}{(r^p - 1)} \quad (5.6)$$

onde F_s é um fator de segurança. Recomenda-se [Roache, 1994] que o fator de segurança seja $F_s = 3,0$ para comparações de duas malhas, e $F_s = 1,25$ para comparações de três malhas. O erro relativo ε_{12} é definido como,

$$\varepsilon_{12} = \frac{f_2 - f_1}{f_1} \quad (5.7)$$

sendo f_1 a solução obtida da malha mais refinada, e f_2 a solução da malha intermediária. Analogamente, é possível determinar o índice de convergência de malha para a malha 2, GCI_{23} , empregando-se as Equações (5.6) e (5.7). Na Eq. (5.6), p é a ordem de convergência, a qual pode ser diretamente obtida a partir de três soluções usando um fator de refinamento de malha r constante,

$$p = \frac{\ln\left(\frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1}\right)}{\ln r} \quad (5.8)$$

sendo adotado $r = 2$ no presente trabalho, ou seja, a malha mais grosseira (identificada como malha 3 na Tab. 5.3) terá a metade da quantidade de volumes em cada direção que a malha intermediária (malha 2 na Tab. 5.3), a qual possuirá a metade da quantidade de volumes em cada direção que a malha mais refinada (malha 1 na Tab. 5.3).

Após a determinação dos índices de convergência de malha GCI_{12} e GCI_{23} , pode-se verificar a convergência da solução para a faixa assintótica através de:

$$\chi = \frac{GCI_{23}}{r^p GCI_{12}} \quad (5.9)$$

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

A Tab. 5.4 apresenta os resultados do estudo de convergência de malha para as malhas e a variáveis selecionadas apresentadas na Tab. 5.3. Cabe ressaltar que os valores de GCI_{12} , GCI_{23} e χ devem ser calculados separadamente para cada variável-chave que foi selecionada para o estudo de convergência de malha.

Observa-se, na Tab. 5.4, que o valor do GCI_{12} apresenta níveis adequados de precisão para todas as variáveis, além do valor de χ ser muito próximo de um, indicando que tais resultados estão dentro da faixa assintótica.

Tabela 5.4 - Índice de convergência de malha para as variáveis: fração radiativa, temperatura máxima e frações molares máximas de CO_2 e H_2O .

	f_{rad}	T_{max}	$x_{\text{CO}_2,max}$	$x_{\text{H}_2\text{O},max}$
GCI_{12} [%]	$5,7 \times 10^{-2}$	$3,0 \times 10^{-1}$	$4,1 \times 10^{-2}$	$7,2 \times 10^{-2}$
GCI_{23} [%]	$1,5 \times 10^{-1}$	$1,1 \times 10^0$	$1,1 \times 10^0$	$5,2 \times 10^{-1}$
χ	1,00072	1,00658	1,00860	0,99643

Dessa maneira, considera-se que a malha 1 (48×140 volumes) seja apropriada para ser utilizada no presente trabalho. Esta malha, mostrada na Fig. 5.2, é uniformemente espaçada em ambas as direções r e z , sendo mais refinada somente na região próxima da sua parede periférica, para capturar possíveis efeitos da camada limite que se forma naquela região. O motivo de se utilizar a malha uniformemente espaçada em ambas as direções deve-se ao fato de que os gradientes de temperatura e de concentrações de espécies químicas no interior da câmara de combustão apresentam expressivas variações em todo o domínio, como será visto nos resultados apresentados no Cap. 6.



Figura 5.2 - Malha com 48×140 volumes utilizada nos cálculos.

Considerando que as simulações foram realizadas em um computador *desktop* com processador AMD FX-8150 Eight-Core 3,6 GHz e 16,0 GB de memória, os custos computacionais, em termos de segundos de CPU por iteração, para os três níveis de refinamento de malha estudados são 0,115, 0,352, e 1,036, respectivamente. Para a malha adotada no presente estudo, malha 1, são necessárias aproximadamente 70000 iterações para obter a solução convergida, resultando então em um tempo total de aproximadamente 20 horas, o qual é aceitável para os propósitos do presente estudo.

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

5.5 Verificação do balanço de energia na câmara

Para verificação do código utilizado na pesquisa, foi realizado o cálculo do balanço de energia na câmara de combustão. Este cálculo foi feito para duas condições distintas, ou seja, considerando o cálculo dos efeitos da transferência de calor por radiação na câmara, e desprezando-os. Os resultados destes cálculos estão apresentados na Tab. 5.5. Nesta tabela, os seguintes valores estão mostrados:

- E1: Energia referente ao fluxo de combustível na entrada da câmara, obtida com a entalpia do combustível na temperatura de 313,15 K.
- E2: Energia referente ao fluxo de ar na entrada da câmara, obtida com a entalpia do ar na temperatura de 323,15 K.
- E3: Energia referente à entalpia de combustão, avaliada na temperatura de entrada do combustível, 313,15 K.
- S1: Energia existente na saída da câmara referente ao combustível que não reagiu.
- S2: Energia existente na saída da câmara referente ao fluxo de gases quentes.
- S3: Energia que chega às paredes da câmara (convecção e radiação) para ser transferida ao exterior.

A diferença entre a quantidade de energia que entra na câmara e a que sai, é de aproximadamente 1,8% e 2,3%, respectivamente para os casos que considera e que despreza a radiação térmica dos cálculos, sendo esta diferença aceitável e resultante, por exemplo, do critério de convergência considerado, das aproximações numéricas impostas, e do cálculo da transferência de calor pelas paredes. O balanço global de massa na câmara ficou com diferença relativa da ordem de 10^{-6} entre as vazões mássicas que entram (ar e combustível) e as que saem da câmara (combustível residual e produtos).

Tabela 5.5 - Análise do balanço de energia na câmara de combustão.

Entrada [kW]		Saída [kW]		
			sem radiação	com radiação
E1. Combustível	8,4	S1. Comb. não queimado	2,7	0,8
E2. Ar	65,2	S2. Gases de exaustão	533,3	487,2
E3. Ent. de combustão	561,6	S3. Paredes	84,7	135,7
Total	635,2	Total	620,7	623,7

5.6 Influência de variações nas condições turbulentas de entrada

Segundo Celik et al., 2008, deve-se reconhecer que incertezas nas condições de contorno de entrada, tais como aquelas relacionadas com a turbulência, podem alterar os resultados das simulações, sendo recomendado que o grau de sensibilidade da solução apresentada a pequenas variações nas condições de entrada seja estudado e reportado. No presente trabalho, foram realizadas simulações adicionais impondo variações de $\pm 10\%$ nas condições turbulentas de entrada descritas na Seção 5.2:

- intensidade de turbulência da corrente de ar: $6\% \pm 0,6\%$
- intensidade de turbulência da corrente de combustível: $10\% \pm 1,0\%$
- comprimento característico da escala de turbulência da corrente de ar: $0,04 \pm 0,004$ m
- comprimento característico da escala de turbulência da corrente de combustível: $0,03 \pm 0,003$ m

Em cada simulação realizada somente uma condição turbulenta de entrada foi alterada, mantendo as demais fixas no valor padrão (sem perturbação), possibilitando a verificação do efeito da variação de cada condição de entrada isoladamente sobre os resultados.

Para este estudo, considerou-se a fração radiativa, temperatura máxima, e frações molares máximas de CO_2 e de H_2O como variáveis-chave, sendo então reportados os efeitos das variações nas condições turbulentas de entrada sobre estas variáveis. Na Seção 5.4, onde foi apresentado o estudo de convergência de malha, estas mesmas quatro variáveis foram selecionadas. Os resultados desta análise estão mostrados nas Tabelas 5.6 e 5.7, onde estão apresentados os valores das variáveis-chave obtidos em cada simulação com variação na condição de entrada, e logo abaixo de cada variável-chave estão apresentados os valores dos desvios percentuais destas variáveis em relação ao resultado da simulação realizada sem perturbação (apresentados na Tab. 5.3 para malha 48×140).

Os resultados das Tabelas 5.6 e 5.7 sugerem que variações na intensidade de turbulência conduzem a alterações maiores nas variáveis-chave do que variações no comprimento característico da escala de turbulência. De modo geral, as variações no comprimento característico da escala de turbulência levaram a desvios percentuais das variáveis-chave da ordem de $10^{-2}\%$, com desvio máximo de $0,348\%$ para a fração radiativa e mínimo de $0,006\%$ para a fração molar máxima de H_2O , enquanto as variações na intensidade de turbulência levaram a desvios percentuais das variáveis-chave da ordem de $10^{-1}\%$, com

desvio máximo de 1,514% para a fração radiativa e mínimo de 0,029% para a temperatura máxima. A partir desta análise, pode-se considerar que variações nas condições turbulentas de entrada possuem efeito secundário sobre os principais resultados das simulações.

Tabela 5.6 - Efeito da variação das condições de contorno na entrada da câmara (intensidade de turbulência nas correntes de ar e de combustível) sobre as variáveis-chave da simulação:

$$f_{rad}, T_{max}, x_{CO2,max} \text{ e } x_{H2O,max}.$$

	Ar		Combustível	
	5,4%	6,6%	9,0%	11,0%
f_{rad} [%]	9,628	9,914	9,749	9,813
desvio %	1,514	1,412	0,276	0,378
T_{max} [K]	1800,09	1800,19	1798,42	1800,52
desvio %	0,029	0,035	0,063	0,053
$x_{CO2,max}$	0,09782	0,09732	0,09669	0,09717
desvio %	0,935	0,427	0,230	0,265
$x_{H2O,max}$	0,19558	0,19777	0,19762	0,19792
desvio %	1,144	0,035	0,113	0,043

Tabela 5.7 - Efeito da variação das condições de contorno na entrada da câmara (comprimento característico da escala de turbulência nas correntes de ar e de combustível) sobre as

$$\text{variáveis-chave da simulação: } f_{rad}, T_{max}, x_{CO2,max} \text{ e } x_{H2O,max}.$$

	Ar		combustível	
	0,036 m	0,044 m	0,027 m	0,033 m
f_{rad} [%]	9,782	9,769	9,750	9,810
desvio %	0,061	0,072	0,266	0,348
T_{max} [K]	1800,10	1798,98	1798,45	1800,38
desvio %	0,030	0,032	0,062	0,046
$x_{CO2,max}$	0,09694	0,09686	0,09669	0,09716
desvio %	0,035	0,055	0,231	0,257
$x_{H2O,max}$	0,19786	0,19783	0,19762	0,19792
desvio %	0,008	0,006	0,110	0,041

5.7 Verificação da importância das forças de empuxo

A importância das forças de empuxo em um escoamento com convecção pode ser estimada pela razão entre os números de Grashof e Reynolds [Fluent, 2009]:

$$Ri = \frac{Gr}{Re^2} = \frac{g\beta\Delta TL}{v^2} \quad (5.10)$$

onde Ri é o número de Richardson, Gr é o número de Grashof, Re é o número de Reynolds, g é a aceleração da gravidade, β é o coeficiente de expansão térmica, ΔT é a variação de temperatura, L é o comprimento característico, e v é a velocidade característica.

Quando o número de Richardson for maior ou igual a um, espera-se que a contribuição das forças de empuxo seja significativa. Por outro lado, se ele for inferior a 10^{-1} , as forças de empuxo podem ser ignoradas nos cálculos, sendo o escoamento dominado pela convecção forçada.

Considerando, na Eq. (5.10), ΔT como a diferença entre a temperatura média na câmara e a temperatura das suas paredes, e L como o raio da câmara, o número de Richardson apresenta um valor de $1,9 \times 10^{-2}$ no presente estudo, confirmando assim a validade da hipótese mencionada na Seção 5.1, de que as forças de empuxo poderiam ser desprezadas devido às altas velocidades impostas pelo queimador.

Adicionalmente, outro argumento para desprezar este efeito resulta da investigação de Silva et al., 2013, na qual os autores aplicaram uma metodologia RANS em coordenadas cilíndricas tridimensionais utilizando o software Ansys CFX para simular a mesma câmara de combustão aqui estudada. A investigação tinha como objetivo verificar o efeito da força de empuxo sobre os campos de escoamento, temperatura e espécies químicas. Comparando os resultados obtidos em simulações considerando a força de empuxo nos cálculos e obtidos em simulações desprezando tal efeito, os autores encontraram que a força de empuxo poderia ser negligenciada.

5.8 Comparação com resultados da literatura

Silva et al., 2007, simulou a mesma chama turbulenta não pré-misturada de metano em ar [Garréon e Simonin, 1994] considerada no presente estudo, utilizando para a solução da

ETR o Método das Zonas [Hottel e Sarofim, 1967] e aplicando o modelo WSGG com os coeficientes clássicos de Smith et al., 1982.

Considerando como base os resultados obtidos por Silva et al., 2007, pretende-se nesta seção do trabalho comparar tais resultados com os obtidos através de uma nova simulação daquela chama turbulenta, porém empregando o método de ordenadas discretas para a solução da ETR, e aplicando os mesmos coeficientes clássicos do modelo WSGG. Desta forma, a única variação entre as simulações de Silva et al., 2007, e as simulações da presente análise está centrada na alteração do método de solução da ETR, ou seja, do Método das Zonas para o DOM, sendo assim possível fazer a validação do código de solução da ETR utilizando o DOM.

Cabe salientar que a solução da ETR aplicando o DOM será utilizada nos capítulos subsequentes deste trabalho, uma vez que tal método oferece algumas vantagens em relação ao Método das Zonas, tais como maior eficiência numérica em relação ao tempo computacional (aproximadamente um quarto do tempo), flexibilidade na aplicação de modelos de propriedades espectrais, possibilidade de considerar os efeitos da não-homogeneidade de concentrações de espécies no meio, e possibilidade de considerar o efeito do espalhamento da radiação térmica no meio participante.

As Figuras 5.3 a 5.7 apresentam os perfis de temperatura e de frações mássicas de CH_4 , CO_2 , O_2 e CO ao longo da linha de centro da câmara de combustão obtidos no presente trabalho (utilizando DOM) e os resultados de Silva et al., 2007 (utilizando Método das Zonas). Observam-se nestas figuras que os resultados da simulação que utiliza o método DOM estão muito próximos daqueles obtidos em Silva et al., 2007, com desvio médio de 1,9% na Fig. 5.3 (temperatura), 2,1% na Fig. 5.4 (fração mássica de CH_4), 3,0% na Fig. 5.5 (fração mássica de CO_2), 1,8% na Fig. 5.6 (fração mássica de O_2), e 3,3% na Fig. 5.7 (fração mássica de CO), considerando-se então que o código numérico pode ser utilizado nas simulações seguintes.

A comparação dos resultados da presente pesquisa com os dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994, será apresentada no Cap. 6 deste trabalho.

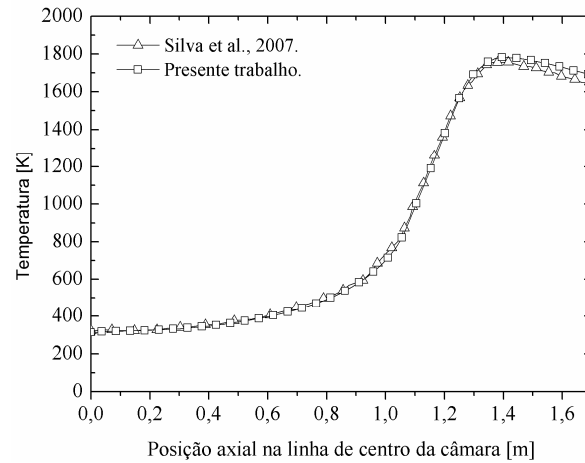


Figura 5.3 - Perfis de temperatura na linha de centro da câmara de combustão.

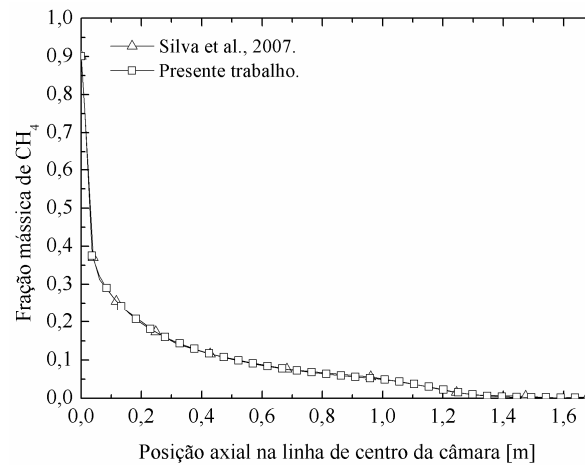


Figura 5.4 - Perfis de frações mássicas de CH_4 na linha de centro da câmara de combustão.

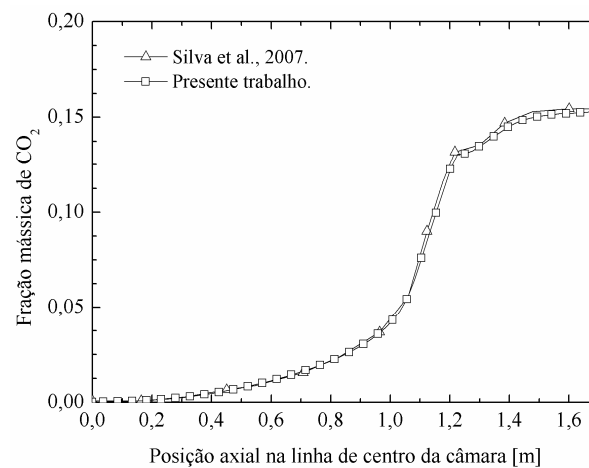


Figura 5.5 - Perfis de frações mássicas de CO_2 na linha de centro da câmara de combustão.

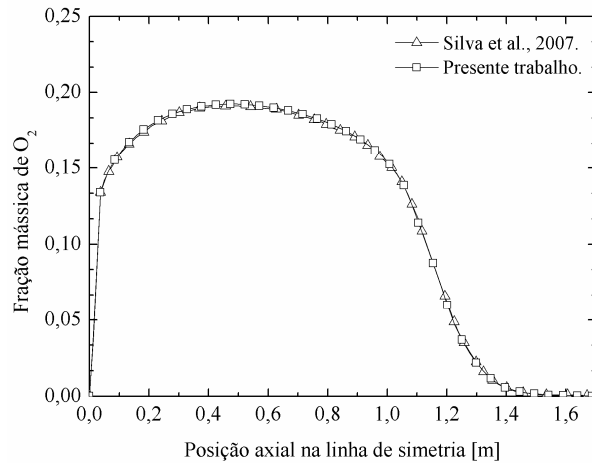


Figura 5.6 - Perfis de frações mássicas de O_2 na linha de centro da câmara de combustão.

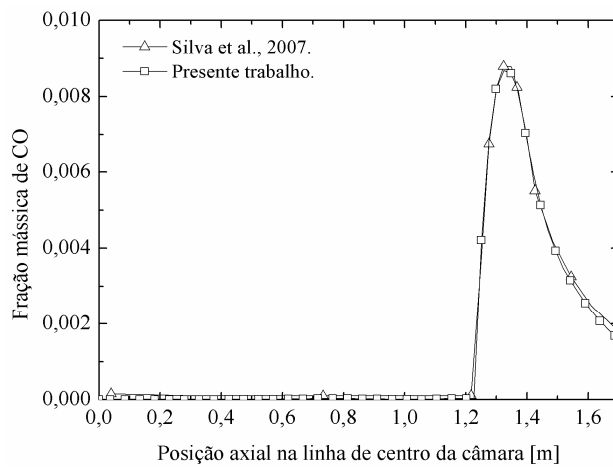


Figura 5.7 - Perfis de frações mássicas de CO na linha de centro da câmara de combustão.

6 RESULTADOS

6.1 Comparação de diferentes modelos WSGG e GC para o cálculo da radiação térmica

Esta seção apresenta os resultados da simulação numérica de uma chama turbulenta de metano e ar não pré-misturados dentro de uma câmara de combustão cilíndrica, levando em consideração os efeitos da radiação térmica de gases com comportamento não-cinza através do modelo WSGG, baseando-se nas correlações clássicas de Smith et al., 1982, e nas novas correlações de Dorigon et al., 2013, geradas a partir do banco de dados espectrais HITEMP 2010 [Rothman et al., 2010], e através do modelo GC baseando-se nas correlações de Cassol et al., 2014, também geradas a partir do banco de dados HITEMP 2010. Os resultados apresentados nesta seção foram obtidos com cálculos acoplados radiação-CFD, ou seja, as equações de conservação foram resolvidas de maneira acoplada à equação de transferência radiativa.

Desta maneira, objetiva-se avaliar a influência das diferentes correlações dos modelos de propriedades radiativas dos gases sobre a radiação e consequentemente sobre o comportamento térmico global da câmara.

Para avaliação das soluções propostas, estuda-se o caso descrito por Garréton e Simonin, 1994, uma vez que estão disponíveis medições detalhadas das distribuições espaciais das principais espécies gasosas assim como do campo de temperatura.

A transferência de calor radiativa em gases depende do número de moléculas participantes por unidade de volume. Neste trabalho, o coeficiente de absorção por unidade de pressão para o j -ésimo gás cinza para o modelo WSGG, $\kappa_{g,j,p}$ (em $\text{m}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$), presente nas Tabelas 3.1 e 3.2, foi multiplicado pelo somatório das pressões parciais das espécies H_2O e CO_2 para cada volume de controle computacional, obtendo o coeficiente de absorção para o j -ésimo gás cinza, $\kappa_{g,j}$ (em m^{-1}), necessário para o cálculo da ETR, Eq. (3.45). Assim, a não-homogeneidade das concentrações de H_2O e CO_2 dentro da câmara de combustão também foi levada em conta para calcular a transferência radiativa. Analogamente, este processo foi realizado para o cálculo do coeficiente de absorção de cada volume de controle computacional no modelo GC.

As simulações foram executadas em um computador *desktop* com processador AMD FX-8150 Eight-Core 3,6 GHz e 16,0 GB de memória. O tempo total de simulação foi

aproximadamente de 27,5 horas para o caso considerando radiação térmica com o modelo WSGG de Dorigon et al., 2013, de 20 horas para o modelo WSGG de Smith et al., 1982, e de 7,5 horas para o modelo GC de Cassol et al., 2014, enquanto este tempo foi de 2 horas para o caso em que a radiação foi negligenciada dos cálculos. Os cálculos de transferência radiativa foram considerados somente após a solução estar próxima da convergência, e a partir de então, para cada iteração.

Para estudar o efeito da transferência radiativa e da modelagem das propriedades radiativas sobre o comportamento térmico da câmara, foram considerados quatro diferentes cenários.

No primeiro cenário, a radiação foi completamente ignorada, com o objetivo de poder analisar a importância da radiação nesta simulação particular da chama. No segundo e no terceiro cenários, a radiação foi considerada e o coeficiente de absorção foi modelado usando dois modelos WSGG diferentes [Smith et al., 1982; Dorigon et al., 2013]. No quarto cenário, a radiação também foi considerada, mas o coeficiente de absorção foi modelado usando o modelo GC [Cassol et al., 2014].

Foram feitas comparações para verificar como e quanto os cenários radiativos afetaram os campos de temperatura, concentração de CO_2 , concentração de H_2O , concentração de CH_4 , concentração de O_2 , concentração de CO , e do termo fonte de calor radiativo, assim como as quantidades térmicas, tais como a fração radiativa e o fluxo de calor através das paredes da câmara.

A Fig. 6.1 apresenta os resultados para os campos de temperatura e do termo fonte de calor radiativo. As Figuras 6.1(a)-6.1(d) apresentam os campos de temperatura obtidos para os quatro cenários que foram descritos acima, enquanto as Figuras 6.1(e)-6.1(g) mostram os termos fontes de calor radiativo.

Como pode ser visto nas Figuras 6.1(a)-6.1(d), a consideração dos diferentes modelos WSGG e GC teve um importante papel sobre o campo de temperatura.

As temperaturas máximas da chama para os diferentes cenários estão mostradas na Tab. 6.1. Apesar destas temperaturas máximas serem locais, elas podem ser consideradas como uma medida para caracterizar o campo de temperatura inteiro. Como visto, a temperatura máxima diminuiu 58 K, 101 K e 243 K quando comparando os resultados para o caso sem radiação com os resultados dos casos com radiação calculada com os modelos de Smith et al., 1982, de Dorigon et al., 2013, e de Cassol et al., 2014, respectivamente. Em uma investigação semelhante, Li e Modest, 2002b, encontraram um decréscimo na temperatura

máxima de 145 K para uma chama com espessura óptica de 0,474, sendo que a chama do presente estudo possui espessura óptica de aproximadamente 0,43. Assim, o decréscimo que mais se aproximou do reportado por Li e Modest, 2002b, foi aquele obtido com o modelo WSGG de Dorigon et al., 2013.

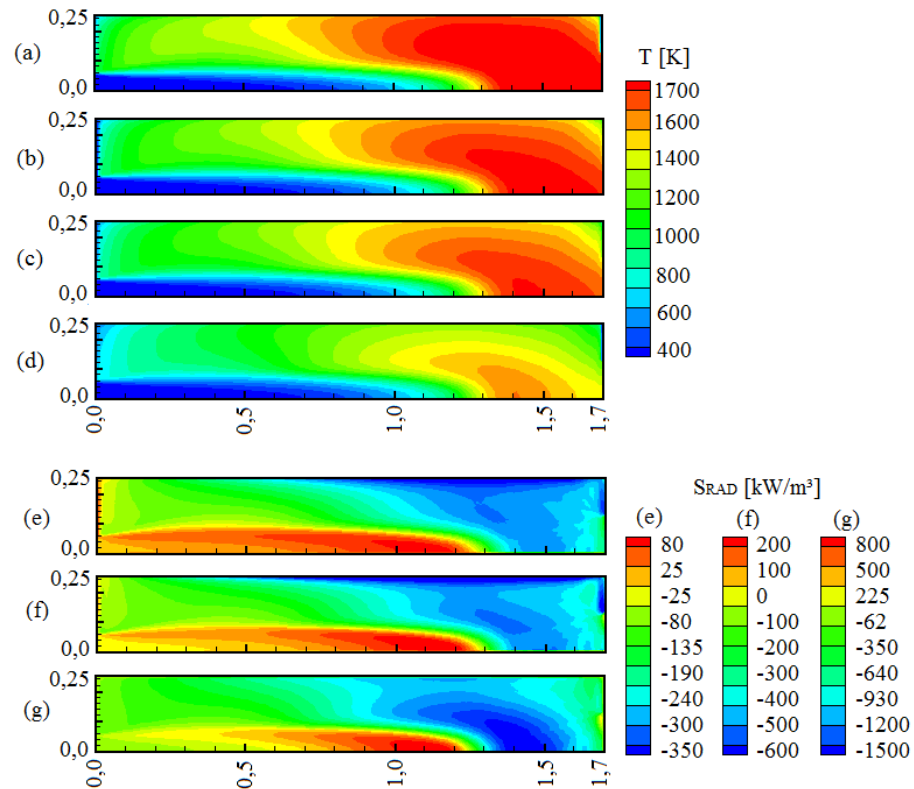


Figura 6.1 - Campos de temperatura: (a) sem radiação; (b) radiação calculada com modelo WSGG de Smith et al., 1982; (c) radiação calculada com modelo WSGG de Dorigon et al., 2013; (d) radiação calculada com modelo GC de Cassol et al., 2014. Campos de termo fonte de calor radiativo: (e) radiação calculada com modelo WSGG de Smith et al., 1982; (f) radiação calculada com modelo WSGG de Dorigon et al., 2013; (g) radiação calculada com modelo GC de Cassol et al., 2014.

Além do campo de temperatura, o campo do termo fonte de calor radiativo também se alterou significativamente como um resultado dos diferentes modelos WSGG e GC.

As Figuras 6.1(e)-6.1(g) mostram os campos dos termos fontes de calor radiativo. O termo fonte de calor radiativo calculado com o modelo WSGG de Dorigon et al., 2013, é mais

elevado do que aquele calculado com o modelo WSGG de Smith et al., 1982, enquanto o termo fonte de calor radiativo calculado com o modelo GC de Cassol et al., 2014, apresenta os maiores valores entre todos os cenários estudados. Contudo, os resultados obtidos com os diferentes modelos são qualitativamente similares, uma vez que a região da chama com as temperaturas mais elevadas emite mais radiação do que absorve, conduzindo a um termo fonte de calor radiativo negativo, enquanto a região da chama com as temperaturas mais baixas absorve mais radiação do que emite, conduzindo a um termo fonte de calor radiativo positivo.

Tabela 6.1 - Temperatura máxima na chama para os quatro cenários radiativos estudados.

	sem radiação	WSGG Smith et al., 1982	WSGG Dorigon et al., 2013	GC Cassol et al., 2014
T_{max} [K]	1809	1751	1708	1566

Os resultados obtidos dos termos fontes de calor radiativo com os modelos WSGG e GC aqui empregados serão comparados ao resultado *benchmark* obtidos com o modelo LBL na Seção 6.1.1, com o objetivo de estimar o erro introduzido na solução da ETR em virtude dos modelos radiativos dos gases participantes.

A Fig. 6.2 apresenta os perfis de temperatura e de frações molares de CH₄, CO₂, H₂O, O₂ e de CO ao longo da linha de centro da câmara, e as Figuras 6.3-6.5 mostram os perfis radiais de temperatura e de frações molares de O₂, CO₂, e de H₂O nas posições axiais $z = 0,312$ m, $z = 0,912$ m, e $z = 1,312$ m a partir da entrada da câmara, respectivamente, considerando os resultados das simulações dos quatro cenários descritos acima, e ainda mostram os dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994 (dados não disponíveis para H₂O).

Observa-se que os valores de temperatura e gradientes de temperatura são menores quando a transferência de calor radiativa é considerada, pois neste caso existe um mecanismo adicional de transferência de calor dentro do domínio computacional. Este comportamento da temperatura e de seus gradientes está em concordância com os resultados de Silva et al., 2007. O mesmo comportamento é observado comparando os resultados obtidos com as diferentes correlações do modelo WSGG, ou seja, uma vez que o uso das correlações de Dorigon et al., 2013, fornece um maior termo fonte de calor radiativo do que o uso das correlações de Smith

et al, 1982, os níveis de temperatura e seus gradientes são menores para as primeiras correlações; ainda, a utilização do modelo GC conduz a uma elevação significativa no termo fonte de calor radiativo, em relação ao emprego do modelo WSGG, fazendo com que os níveis de temperatura e seus gradientes sejam ainda menores. Tal análise pode ser corroborada com os resultados da Fig. 6.1 e da Tab. 6.1.

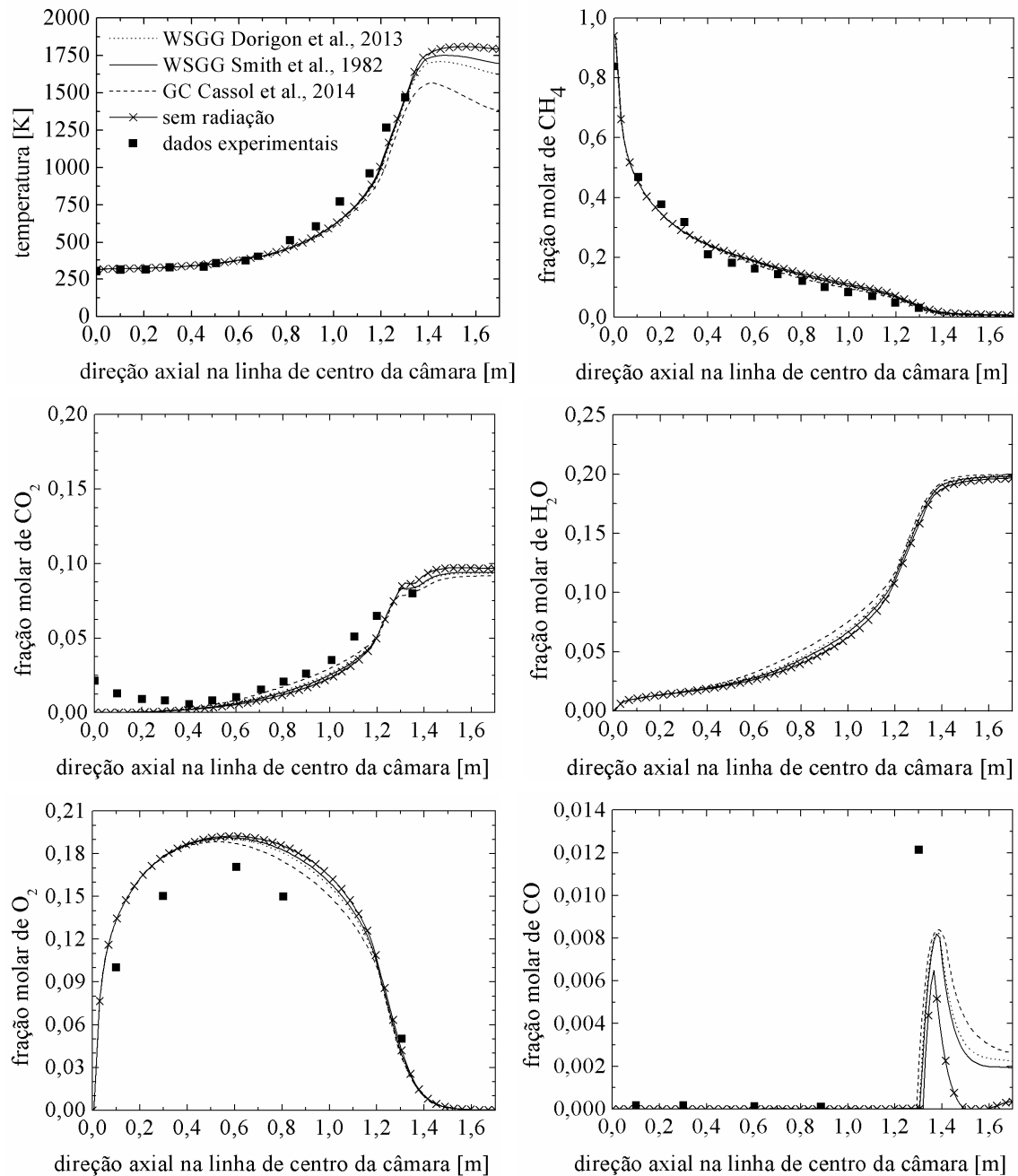


Figura 6.2 - Perfis axiais de temperatura e de frações molares de CH₄, CO₂, H₂O, O₂ e de CO ao longo da linha de centro da câmara.

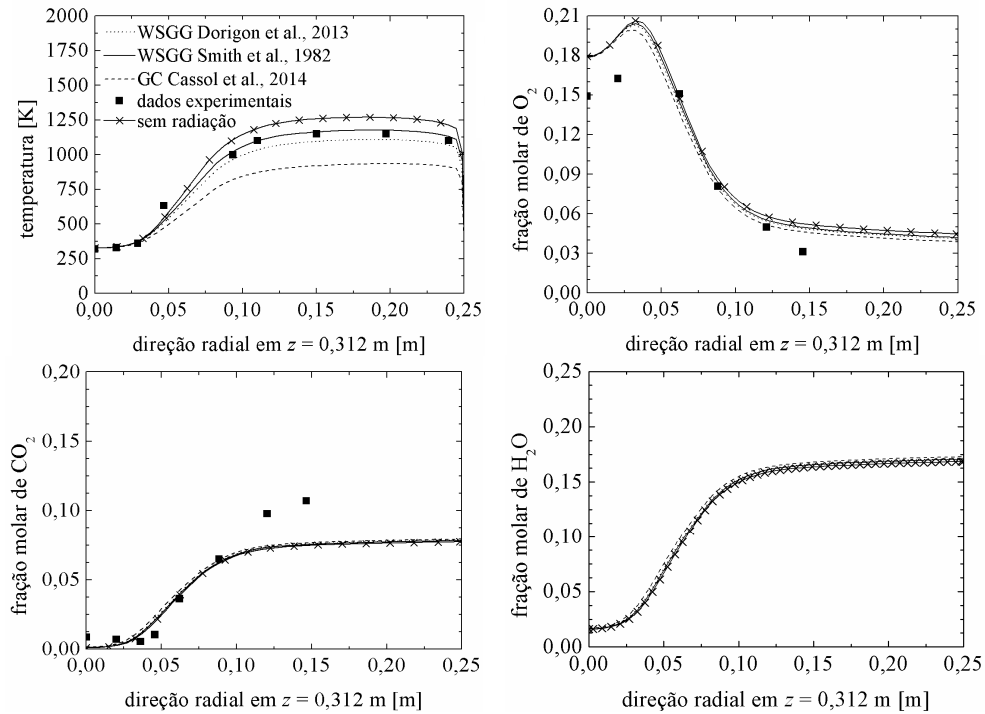


Figura 6.3 - Perfis radiais de temperatura e de frações molares de O_2 , CO_2 , e de H_2O na posição axial $z = 0,312$ m.

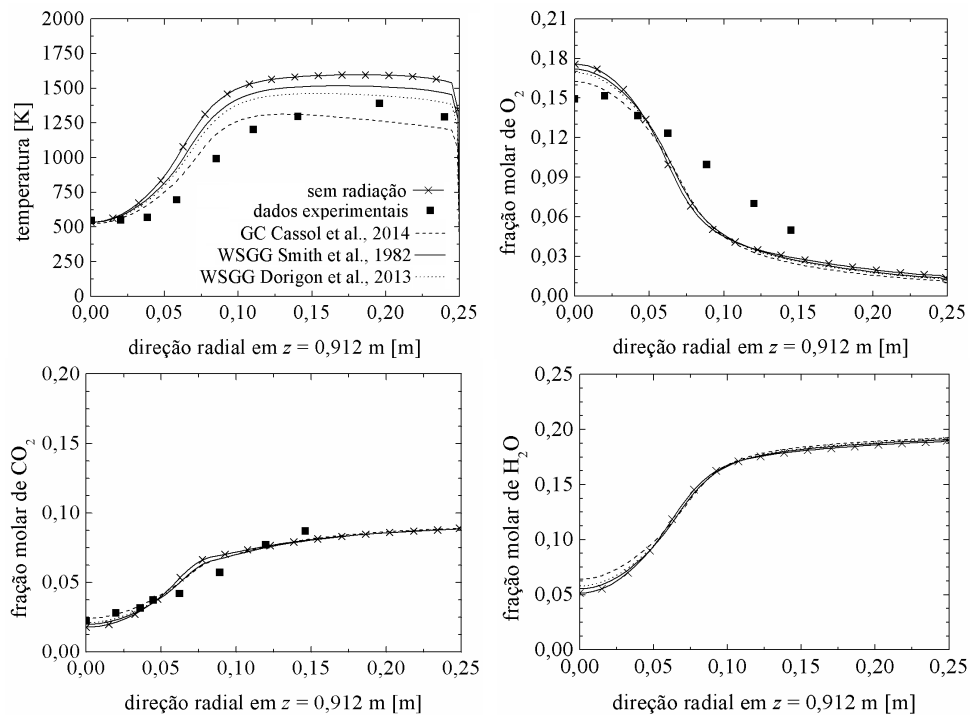


Figura 6.4 - Perfis radiais de temperatura e de frações molares de O_2 , CO_2 , e de H_2O na posição axial $z = 0,912$ m.

Uma vez que as taxas das reações químicas dependem da temperatura, esperava-se que os cálculos de radiação afetassem os cálculos referentes a formação e ao consumo das espécies envolvidas no processo. Apesar disto, as variações médias das frações molares das espécies consideradas, comparando os resultados dos diferentes modelos radiativos entre si, foram inferiores a 1,0%, mostrando que as frações molares das espécies foram menos afetadas pelo modelo de radiação do que foi a temperatura. Isto pode ter sido causado pelo uso de um mecanismo global de cinética química em conjunto com o modelo de combustão E-A, no qual a taxa de reação química é controlada principalmente pela turbulência e, portanto, é menos sensível à temperatura.

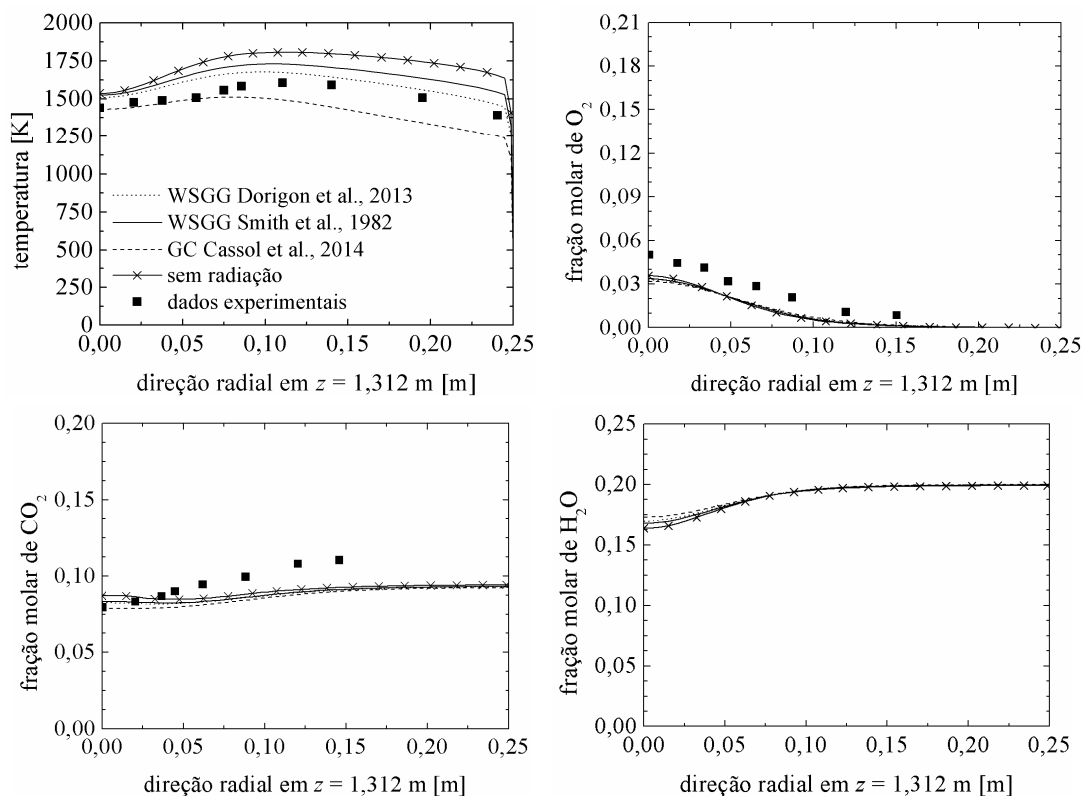


Figura 6.5 - Perfis radiais de temperatura e de frações molares de O₂, CO₂, e de H₂O na posição axial $z = 1,312$ m.

A Tab. 6.2 apresenta os desvios percentuais médios entre os valores de temperatura obtidos numericamente e os dados experimentais reportados em Garréton e Simonin, 1994. Observa-se que o emprego do modelo WSGG com as correlações de Dorigon et al., 2013, conduziu aos menores desvios. Conforme pode ser observado nas Figuras 6.2-6.5, os

diferentes cenários radiativos afetaram marginalmente as frações molares das espécies, sendo os desvios percentuais médios, em relação aos dados experimentais, para todos os cenários de aproximadamente 15%, 32%, 99%, e 30%, para as espécies CH₄, CO₂, CO e O₂, respectivamente. Tais desvios percentuais médios das frações molares das espécies possuem valores relativamente elevados uma vez que os valores absolutos das frações molares das espécies são pequenos, da ordem de 10⁻¹ ou 10⁻², ou menor, sendo assim, mesmo pequenas variações nestes valores conduzem a grandes desvios percentuais. As Figuras 6.2-6.5 mostram que, para todos os modelos de radiação, a temperatura e as frações molares das espécies (CO₂, CH₄, O₂, e CO) seguiram a mesma tendência dos dados experimentais, apesar de apresentarem alguns desvios. Tais diferenças provavelmente tiveram pouca relação com a escolha do modelo de radiação, sendo geradas das limitações dos outros modelos (turbulência, combustão e mecanismo de cinética química) e da complexidade inerente à reprodução do experimento físico.

Tabela 6.2 - Desvios percentuais médios entre os resultados numéricos de temperatura e os dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994, para os quatro cenários radiativos estudados.

sem radiação [%]	WSGG Smith et al., 1982 [%]	WSGG Dorigon et al., 2013 [%]	GC Cassol et al., 2014 [%]
12,68	9,44	8,36	9,10

As Figuras 6.6(a) e 6.6(b) apresentam as distribuições das frações molares para as espécies químicas gasosas mais importantes para a radiação, H₂O e CO₂, enquanto a razão entre estas duas quantidades está mostrada na Fig. 6.6(c). Estas figuras foram obtidas para o cenário que emprega nos cálculos o modelo WSGG de Dorigon et al., 2013, embora as distribuições destas espécies químicas para os demais cenários radiativos não tenham apresentado diferenças significativas, conforme discutido anteriormente nas Figuras 6.2-6.5. Assim, a Fig. 6.6(c) mostra a razão x_{H_2O}/x_{CO_2} (a qual é equivalente a p_{H_2O}/p_{CO_2}) dentro do domínio da câmara de combustão. Observa-se que quase toda a câmara possui uma razão próxima de 2,0, o que é um importante aspecto para modelar as propriedades radiativas do meio, indicando que o uso do modelo WSGG com correlações obtidas para uma razão fixa $x_{H_2O}/x_{CO_2} = 2,0$, conforme visto nas Tabelas 3.1 e 3.2, é de fato uma boa escolha.

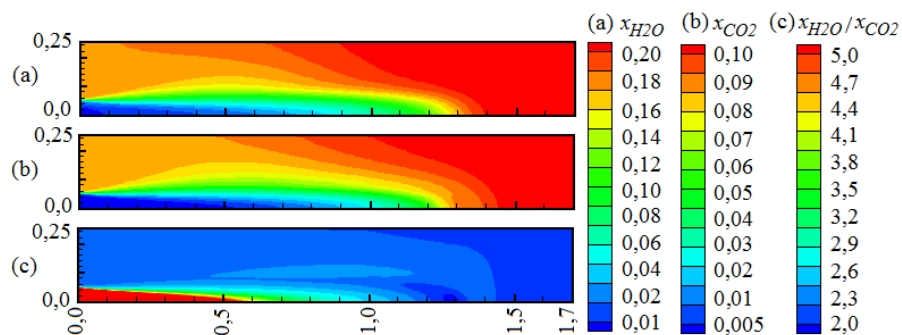


Figura 6.6 - Distribuições das frações molares das espécies químicas: (a) H_2O , (b) CO_2 ; (c) razão entre as frações molares de H_2O e de CO_2 .

Uma visão adicional do efeito da radiação térmica está apresentada na Tab. 6.3, a qual apresenta a taxa de transferência de calor através da parede da câmara. A consideração da radiação térmica nos cálculos possui um efeito importante no modo de transferência de calor combinado radiação-convecção, levando a um aumento na transferência de calor total de 89,52 kW (somente convecção - cenário de cálculo sem transferência de calor por radiação) para 159,61 kW (somatório de convecção e radiação – cenário de cálculo incluindo radiação) com o modelo WSGG e 229,20 kW (somatório de convecção e radiação – cenário de cálculo incluindo radiação) com o modelo GC. O padrão destes resultados está em concordância com os resultados de Silva et al., 2007, que mostraram que a transferência de calor através da parede da câmara era aproximadamente duplicada quando radiação era levada em conta.

Tabela 6.3 - Taxa de transferência de calor na parede cilíndrica da câmara de combustão para os quatro cenários radiativos estudados.

	taxa somente convecção [kW]	taxa somente radiação [kW]	taxa total (radiação + convecção) [kW]
sem radiação	89,52	0,00	89,52
WSGG Smith et al., 1982	81,82	51,66	133,48
WSGG Dorigon et al., 2013	76,04	83,57	159,61
GC Cassol et al., 2014	62,12	167,08	229,20

Com base nos resultados da Tab. 6.3, é interessante observar que, quando a radiação

térmica foi considerada, a transferência de calor por convecção diminuiu em comparação a quando a radiação térmica foi desprezada, uma vez que os gradientes de temperatura na câmara foram reduzidos devido à fonte de calor adicional. Ainda, os resultados mostraram que a transferência de calor radiativa foi maior quando foram usadas as novas correlações do modelo WSGG, como esperado pois o termo fonte de calor radiativo (Fig. 6.1) foi maior com estas novas correlações; similarmente, o emprego do modelo GC conduziu a transferência de calor radiativa ainda mais elevada na parede em relação ao modelo WSGG.

Uma quantidade importante que descreve o campo global de radiação em uma chama é a taxa líquida de transferência radiativa na chama e sua variável normalizada, a fração radiativa (f_{rad}). A taxa líquida de transferência radiativa corresponde à integral de $\overline{S_{rad}}$ sobre todo o domínio computacional; a fração radiativa é a razão deste valor pela taxa de calor liberada na combustão. Para todos os cenários descritos estas quantidades foram calculadas e os resultados estão mostrados na Tab. 6.4. Tanto a taxa líquida de transferência radiativa, quanto a correspondente fração radiativa, para a chama em estudo possuem valores significativos, demonstrando a relevância do estudo da radiação térmica na presente câmara. Em relação ao cenário de cálculo que emprega o modelo WSGG de Smith et al., 1982, a fração radiativa aumentou 64% usando as novas correlações do modelo WSGG e 345% usando o modelo GC de Cassol et al., 2014.

Tabela 6.4 - Predições da taxa líquida de transferência radiativa e da fração radiativa.

	taxa radiativa líquida [kW]	f_{rad} [%]
WSGG Smith et al., 1982	62,63	10,48
WSGG Dorigon et al., 2013	103,25	17,21
GC Cassol et al., 2014	219,21	36,15

Adicionalmente, a Fig. 6.7 mostra perfis axiais do termo fonte de calor radiativo ao longo da linha de centro da câmara obtidos com os modelos WSGG de Smith et al., 1982, WSGG de Dorigon et al., 2013, e GC de Cassol et al., 2014, considerando e negligenciando a não-homogeneidade das concentrações das espécies H₂O e CO₂ no interior da câmara de combustão para o cálculo da radiação térmica. A Tab. 6.5 apresenta os valores de temperatura máxima na chama e da fração radiativa para os mesmos casos mostrados na Fig. 6.7.

Assim, nos cálculos em que a não-homogeneidade das espécies foi desconsiderada, o

coeficiente de absorção por unidade de pressão para o j -ésimo gás cinza no modelo WSGG, $\kappa_{g,j,p}$ (em $\text{m}^{-1}\text{atm}^{-1}$), não foi multiplicado pelo somatório das pressões parciais das espécies H_2O e CO_2 para cada volume de controle computacional para obter o coeficiente de absorção para o j -ésimo gás cinza, $\kappa_{g,j}$ (em m^{-1}), mas, neste caso, $\kappa_{g,j,p}$ foi multiplicado pelo somatório de valores constantes das pressões parciais de H_2O e de CO_2 ($p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,2 \text{ atm}$ e $p_{\text{CO}_2} = 0,1 \text{ atm}$). Este resultado permitiu a avaliação do efeito da não-homogeneidade das concentrações de H_2O e de CO_2 dentro da câmara de combustão sobre a transferência de calor radiativa.

Tanto na Fig. 6.7 quanto na Tab. 6.5 pode-se observar que o efeito da não-homogeneidade das espécies químicas, apesar de não ser elevado, não deve ser desprezado no cálculo da radiação térmica, sendo que sua influência corresponde a um aumento no campo de radiação na chama de aproximadamente 10%.

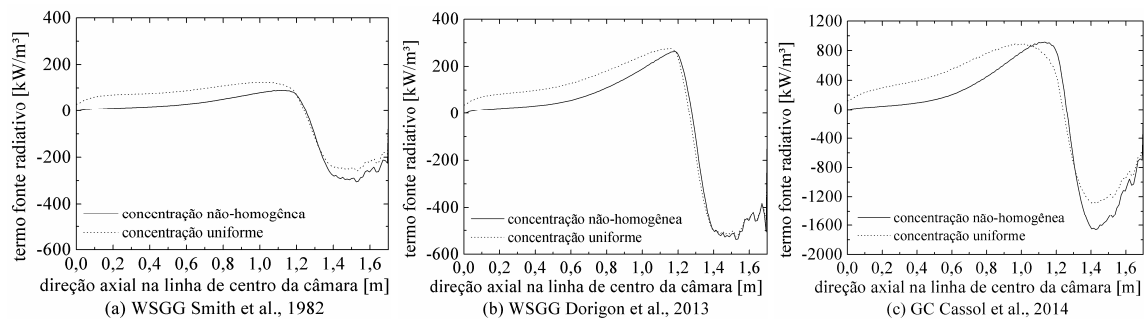


Figura 6.7 - Perfis axiais do termo fonte de calor radiativo ao longo da linha de centro da câmara obtidos empregando os modelos (a) WSGG Smith et al., 1982, (b) WSGG Dorigon et al., 2013, e (c) GC Cassol et al., 2014, ambos considerando e desprezando a não-homogeneidade das concentrações de H_2O e CO_2 no cálculo da radiação térmica.

Tabela 6.5 - Temperatura máxima e fração radiativa para os casos considerando e desprezando a não-homogeneidade das concentrações de H_2O e CO_2 no cálculo da radiação.

	Temperatura máxima		Fração radiativa	
	concentração não-homogênea	concentração uniforme	concentração não-homogênea	concentração uniforme
WSGG Smith et al., 1982	1751 K	1757 K	10,48%	9,23%
WSGG Dorigon et al., 2013	1708 K	1716 K	17,21%	15,78%
GC Cassol et al., 2014	1566 K	1599 K	36,15%	31,79%

6.1.1 Avaliação dos modelos WSGG e GC em geometria cilíndrica axissimétrica aplicados em meio participante não-isotérmico composto por H₂O e CO₂: comparação com resultados *benchmark* LBL

A influência do emprego dos modelos WSGG e GC para a representação do coeficiente de absorção dos gases sobre a transferência de calor por radiação pode ser mais bem avaliada isolando seus efeitos em cálculos separados da radiação e então os comparando com resultados *benchmark* obtidos com o modelo LBL.

Isto pode ser feito congelando-se os campos de frações molares e temperatura e então calculando os campos de radiação usando os modelos WSGG de Smith et al., 1982, WSGG de Dorigon et al., 2013, e GC de Cassol et al., 2014, assim como o modelo LBL, considerado como *benchmark* devido a sua elevada resolução espectral.

Estes cálculos são desacoplados dos cálculos de escoamento e combustão (referidos como CFD), portanto erros que possam existir devido aos modelos de turbulência e de combustão não influenciam na comparação dos cálculos de radiação.

Este procedimento foi aplicado usando campos convergidos de temperatura (Fig. 6.1(c)), fração molar de H₂O (Fig. 6.6(a)) e fração molar de CO₂ (Fig. 6.6(b)) obtidos da simulação apresentada na Seção 6.1. Deve-se enfatizar que todos os resultados apresentados previamente na Seção 6.1 foram obtidos com cálculos acoplados radiação-CFD.

A Fig. 6.8 apresenta perfis do termo fonte de calor radiativo calculados com os modelos LBL (*benchmark*), WSGG (Smith et al., 1982; Dorigon et al., 2013) e GC (Cassol et al., 2014), ao longo da linha de centro da câmara e ao longo da direção radial da câmara em duas posições axiais ($z = 1,0$ m e $z = 1,5$ m). Os perfis mostrados na Fig. 6.8 foram extraídos do domínio bidimensional com o objetivo de possibilitar uma comparação mais detalhada entre os diversos resultados, o que não é possível de ser realizado comparando-se os campos como aqueles mostrados nas Figuras 6.1(e)-6.1(g) ou na Fig. 6.9, discutida a seguir. O termo fonte de calor radiativo que mais se aproximou do resultado *benchmark* foi aquele obtido com o emprego do modelo WSGG de Dorigon et al., 2013.

A Fig. 6.9(a) apresenta o campo do termo fonte de calor radiativo *benchmark*, obtido com o modelo LBL. Com o objetivo de avaliar os modelos WSGG e GC de maneira quantitativa, as Figuras 6.9(b)-6.9(d) apresentam os campos de distribuição dos erros relativos percentuais, calculados como,

$$Erro \% = 100 \frac{|\bar{S}_{rad, LBL} - \bar{S}_{rad, MODELO}|}{\bar{S}_{rad, LBL, máx}} \quad (6.1)$$

onde o subscrito “LBL” refere-se ao resultado *benchmark*, e o subscrito “MODELO” refere-se ao resultado obtido com o modelo WSGG ou com o modelo GC. O cálculo do erro pela Eq. (6.1) é a maneira usualmente empregada na literatura para avaliação qualitativa de modelos de radiação [Mossi et al., 2012; Duciak et al., 2013; Dorigon et al., 2013; Cassol et al., 2014].

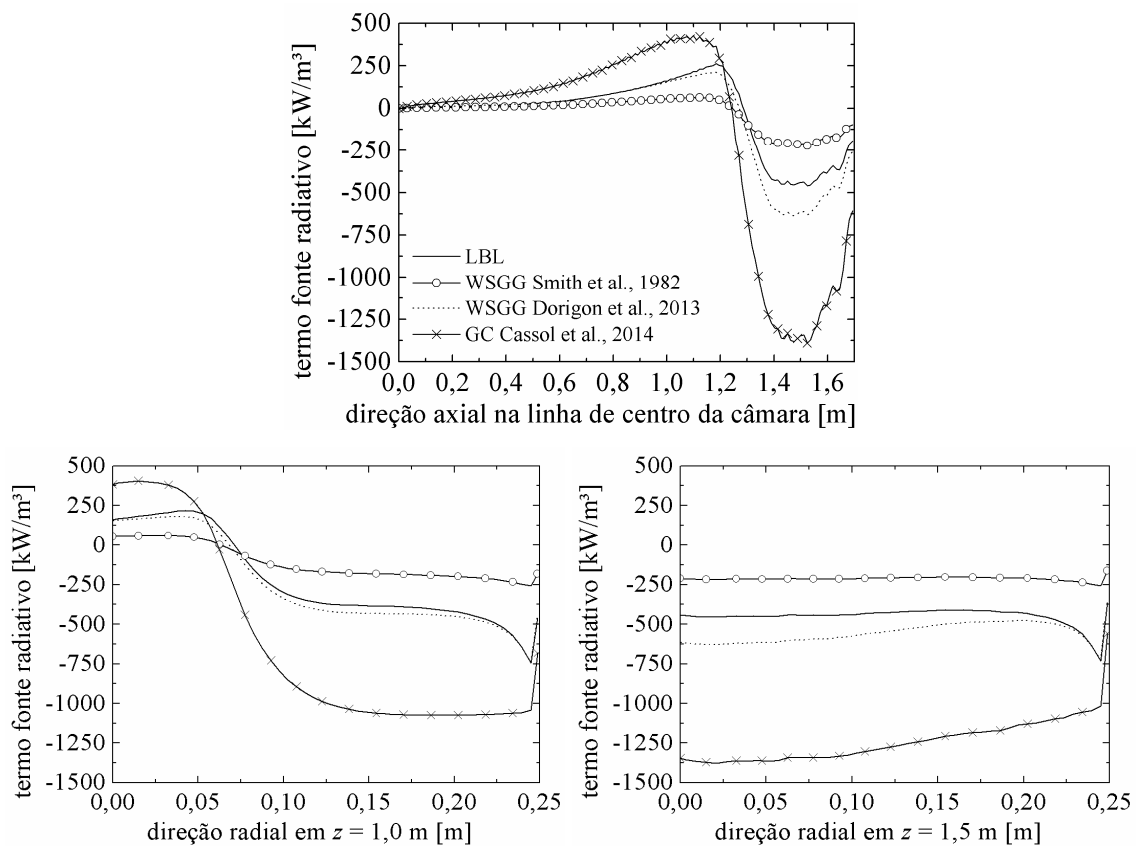


Figura 6.8 - Perfis do termo fonte radiativo calculados com os modelos LBL, WSGG e GC na direção axial e radial.

Após o cálculo do termo fonte de calor radiativo empregando cada um dos modelos, utilizando para todos os cálculos campos fixos de frações molares e de temperatura, a Eq. (6.1) é aplicada em todo o domínio de cálculo, obtendo assim os resultados apresentados nas

Figuras 6.9(b)-6.9(d). O modelo WSGG de Dorigon et al., 2013, teve seus coeficientes ajustados a partir do banco de dados espectrais HITEMP 2010, o qual foi também empregado nos cálculo linha-por-linha no presente trabalho. Conforme se observa nas Figuras 6.8 e 6.9, o modelo WSGG de Dorigon et al., 2013, foi o que forneceu os resultados mais próximos do resultado *benchmark*. O modelo GC de Cassol et al., 2014, também teve seus coeficientes ajustados a partir do banco de dados espectrais HITEMP 2010, porém foi o modelo que apresentou os resultados mais distantes da solução *benchmark*, devido a grosseira simplificação que é considerada neste modelo para o tratamento da dependência espectral do coeficiente de absorção.

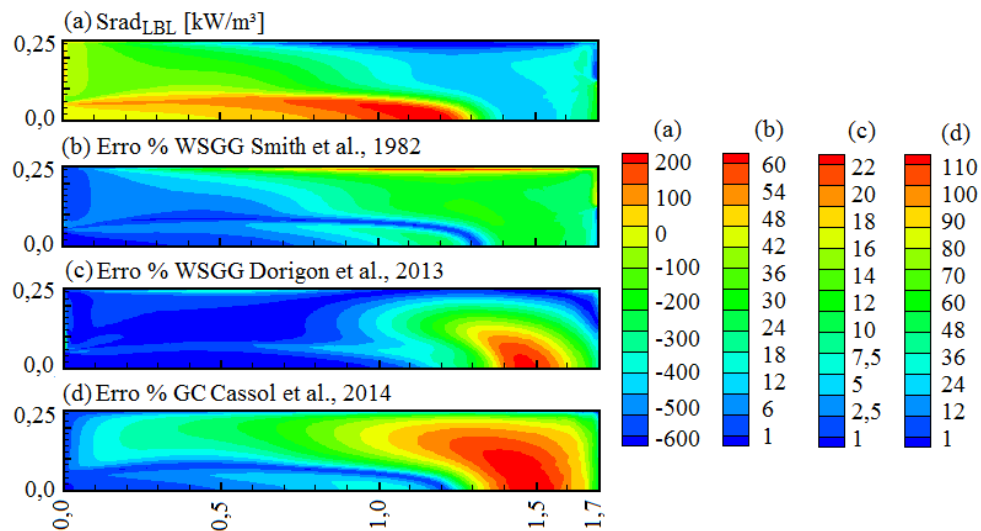


Figura 6.9 - Comparação entre os resultados obtidos para o campo do termo fonte radiativo: (a) termo fonte radiativo obtido com o modelo LBL, (b) erro relativo% entre o termo fonte radiativo obtido com o modelo LBL e o modelo WSGG de Smith et al., 1982, (c) erro relativo% entre o termo fonte radiativo obtido com o modelo LBL e o modelo WSGG de Dorigon et al., 2013, (d) erro relativo% entre o termo fonte radiativo obtido com o modelo LBL e o modelo GC de Cassol et al., 2014.

A Tab. 6.6 apresenta os erros relativos percentuais máximo e médio, e o desvio padrão do erro, para cada um dos modelos, onde se pode notar novamente que o modelo WSGG de Dorigon et al., 2013, foi o que apresentou os menores erros e o menor desvio padrão.

Tabela 6.6 - Erros máximos e médios do termo fonte radiativo para cada modelo em relação ao resultado *benchmark* (LBL).

	Erro máximo %	Erro médio %	Desvio padrão do Erro %
WSGG Smith et al., 1982	64,75	17,5	12,0
WSGG Dorigon et al., 2013	22,49	4,72	5,59
GC Cassol et al., 2014	115,5	49,7	34,2

Mossi et al., 2012, aplicaram o modelo WSGG com as correlações de Smith et al., 1982 e 1987, para o cálculo da transferência de calor radiativa em um meio participante composto por misturas de H₂O/CO₂ ou H₂O/CO₂/fuligem em uma geometria unidimensional, comparando os resultados com soluções LBL. Os autores consideraram o meio não-isotérmico e com concentrações uniformes (meio homogêneo) de gases e de fuligem. Para o caso em que a mistura era somente de gases (H₂O e CO₂), os resultados indicaram erro relativo máximo de 55,6% e médio de 23,1%. Em uma investigação semelhante em geometria unidimensional, Duciak et al., 2013, compararam os resultados do modelo WSGG com as correlações de Dorigon et al., 2013, em relação a soluções LBL para um meio não-isotérmico e não-homogêneo, e obtiveram erro relativo máximo de 56,0% e médio de 2,2%. Cassol et al., 2014, compararam os resultados do modelo GC com os resultados LBL, também em geometrias unidimensionais em um meio não-isotérmico e não-homogêneo, e obtiveram erro relativo máximo de 189,71% e médio de 73,63%.

Os erros do modelo WSGG de Dorigon et al., 2013, apresentados na Fig. 6.9(c) e na Tab. 6.6, podem ser considerados satisfatórios, uma vez que os casos estudados na literatura apresentaram erros da mesma ordem de grandeza, porém para geometrias mais simplificadas (unidimensionais), sendo que o caso cilíndrico axissimétrico estudado no presente trabalho apresenta desafios muito mais complexos do que o caso unidimensional quando se trata da modelagem da radiação, devido aos gradientes de temperatura e de concentrações das espécies químicas. Para o modelo WSGG de Dorigon et al., 2013, somente 17% dos volumes de controle do domínio computacional obtiveram erros superiores a 10%.

O tempo computacional necessário para a obtenção do resultado LBL foi de 13 horas, enquanto para os modelos WSGG e GC é da ordem de 1 segundo, o que justifica o emprego e destaca a importância de modelos globais de propriedades radiativas em cálculos acoplados radiação-CFD.

6.2 Avaliação da influência das Interações Turbulência-Radiação

Esta seção apresenta os resultados da simulação numérica de uma chama turbulenta de metano e ar não pré-misturados dentro de uma câmara de combustão cilíndrica, levando em consideração os efeitos da radiação térmica de gases com comportamento não-cinza através do modelo WSGG, baseando-se no conjunto de correlações de Dorigon et al., 2013, e incluindo os efeitos das interações TRI [Snegirev, 2004].

Desta maneira, objetiva-se avaliar a influência da modelagem das interações TRI sobre a radiação térmica e consequentemente sobre o comportamento térmico global da câmara.

Para avaliação das soluções propostas, estuda-se novamente o caso descrito por Garréton e Simonin, 1994.

Conforme descrito na seção anterior, o efeito da não-homogeneidade das concentrações de H_2O e de CO_2 dentro da câmara foi considerado nos cálculos da transferência de calor radiativa.

As simulações foram executadas utilizando o mesmo computador descrito na seção anterior. Os cálculos de transferência radiativa foram considerados somente após a solução estar próxima da convergência, e a partir de então, para cada iteração. Além disso, o tempo de simulação necessário para o caso considerando as interações TRI foi 36,5 horas (acréscimo de 30% no tempo computacional em relação a simulação que desconsiderou o cálculo das interações TRI), demonstrando a eficiência da metodologia de cálculo das interações TRI considerada no presente trabalho em relação ao tempo computacional.

Para estudar o efeito da transferência radiativa incluindo as interações TRI sobre o comportamento térmico da câmara, foram considerados três diferentes cenários. No primeiro cenário, a radiação foi ignorada, com o objetivo de poder analisar a importância da radiação nesta simulação particular da chama. No segundo e no terceiro cenários a radiação foi considerada, mas os cálculos das interações TRI foram realizados somente para o terceiro cenário, permitindo assim a avaliação dos efeitos das interações TRI.

Foram feitas comparações para verificar como e quanto os cenários radiativos afetaram os campos de temperatura, concentração de CO_2 , concentração de H_2O , concentração de CH_4 , concentração de O_2 , concentração de CO , e do termo fonte de calor radiativo, assim como as quantidades térmicas, tais como a fração radiativa e o fluxo de calor através das paredes da câmara.

A Fig. 6.10 apresenta os resultados para a temperatura e para o termo fonte de calor

radiativo ($\overline{S_{rad}}$). Nas Figuras 6.10(a)-6.10(c) estão mostrados os campos de temperatura obtidos para os três cenários acima descritos, e na Fig. 6.10(d) estão mostrados os valores *rms* (do inglês: *root mean square*) das flutuações de temperatura, calculado como $\sqrt{T'^2}$ [Li e Modest, 2001; Snegirev, 2004]. Observa-se que o valor *rms* da flutuação de temperatura atinge um máximo local de aproximadamente 50% da temperatura média.

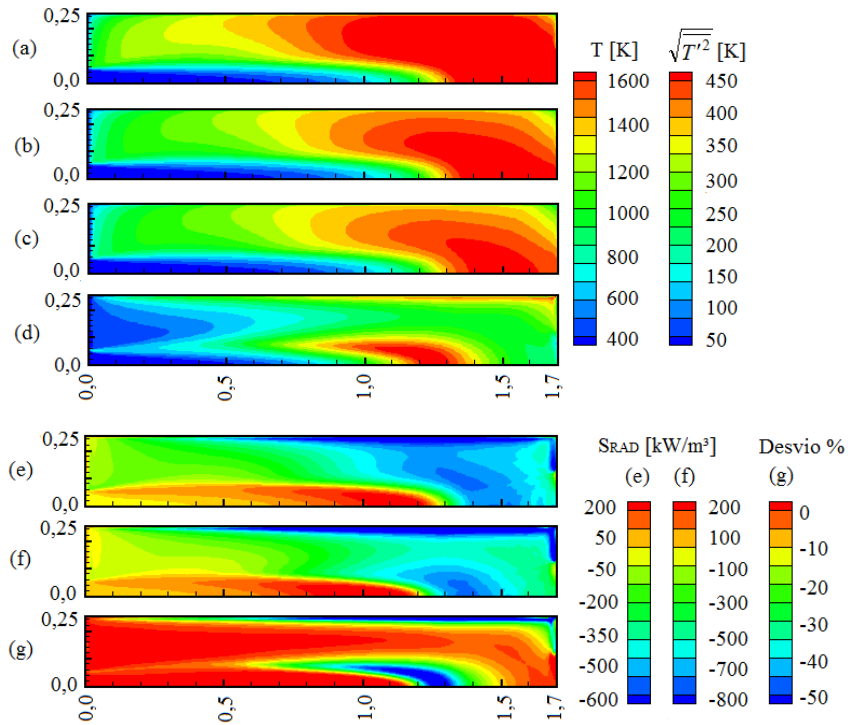


Figura 6.10 - Campos de temperatura: (a) sem radiação; (b) radiação calculada sem TRI; (c) radiação calculada com TRI; (d) valor *rms* das flutuações de temperatura, $\sqrt{T'^2}$. Campos de termo fonte radiativo: (e) radiação calculada sem TRI; (f) radiação calculada com TRI; (g) desvio relativo percentual entre (e) e (f), calculado com a Eq. (6.2).

Nas Figuras 6.10(e)-6.10(g) estão mostrados os termos fontes de calor radiativo obtidos para o segundo e o terceiro cenários, assim como o desvio relativo percentual entre eles, calculado como,

$$Desvio \% = 100 \frac{\overline{S_{rad, com TRI}} - \overline{S_{rad, sem TRI}}}{\overline{S_{rad, sem TRI, máx}}} \quad (6.2)$$

Na Eq. (6.2) os subscritos *com TRI* e *sem TRI* indicam quais cenários radiativos foram usados no cálculo de $\overline{S_{rad}}$.

Como pode ser visto nas Figuras 6.10(a)-6.10(c), a consideração da transferência de calor radiativa e das interações TRI possui um importante papel sobre o campo de temperatura.

As temperaturas máximas da chama para os diferentes cenários estão mostradas na Tab. 6.7. Apesar de estas temperaturas máximas serem locais, elas podem ser consideradas como uma medida para caracterizar o campo de temperatura inteiro.

Tabela 6.7 - Temperatura máxima na chama para os três cenários radiativos estudados.

	sem radiação	sem TRI	com TRI	ΔT_{RAD} [K]	ΔT_{TRI} [K]
T_{max} [K]	1809	1708	1659	101	49

A diminuição da temperatura máxima como um resultado de considerar ou desprezar a transferência de calor radiativa (ΔT_{RAD}) e considerar ou desprezar as interações TRI (ΔT_{TRI}) são então analisadas. Como visto, a temperatura máxima diminuiu $\Delta T_{RAD} = 101$ K e $\Delta T_{TRI} = 49$ K, quando se comparam os resultados para o cenário de cálculo sem radiação em relação ao cenário de cálculo com radiação (mas sem interações TRI), e o cenário de cálculo com radiação (sem interações TRI) em relação ao cenário de cálculo com radiação, mas com interações TRI, respectivamente.

Em investigações semelhantes, Li e Modest, 2002a, encontraram um decréscimo na temperatura máxima de $\Delta T_{TRI} = 110$ K, enquanto em Li e Modest, 2002b, os autores reportaram decréscimos de $\Delta T_{RAD} = 145$ K e $\Delta T_{TRI} = 64$ K para uma chama com espessura óptica de 0,474 (a chama do presente trabalho possui espessura óptica de aproximadamente 0,43). Coelho, 2007, afirma que a transferência de calor radiativa conduz a chamas mais frias, especialmente quando se consideram as interações TRI, as quais contribuem para aproximadamente um terço da diminuição total na temperatura máxima de uma chama difusiva turbulenta de metano-ar, o que está em concordância com os resultados encontrados na presente investigação. Ainda, Poitou et al., 2012, encontraram decréscimos de $\Delta T_{RAD} = 150$ K na temperatura máxima de uma chama difusiva turbulenta de propano-ar.

Assim como o campo de temperatura, o campo do termo fonte de calor radiativo

também se alterou significativamente como um resultado dos diferentes cenários de cálculo de radiação (com e sem interações TRI). As interações TRI podem contribuir para aumentar entre 10% até acima de 50% as intensidades de radiação em chamas difusivas turbulentas de metano ou gás natural [Coelho, 2007].

As Figuras 6.10(e) e 6.10(f) mostram os campos dos termos fonte de calor radiativo. A região da chama com as temperaturas mais elevadas emite mais radiação do que absorve, conduzindo para um termo fonte de calor radiativo negativo, enquanto a região da chama com as temperaturas mais baixas absorve mais radiação do que emite, conduzindo para um termo fonte de calor radiativo positivo. Ainda, a Fig. 6.10(g) mostra o desvio relativo percentual calculado pela Eq. (6.2) entre os termos fontes de calor radiativo obtidos com os diferentes cenários de cálculos de radiação (com e sem interações TRI). O termo fonte de calor radiativo calculado incluindo as interações TRI é maior do que aquele calculado sem as interações. As maiores diferenças estão localizadas no núcleo da chama, onde os níveis de temperatura são intermediários e o termo fonte de calor radiativo é negativo (região de emissão de radiação).

Adicionalmente, a Fig. 6.11 mostra os perfis axiais de $\overline{S_{rad}}$ ao longo da linha de centro da câmara para os dois cenários de cálculo com radiação. A partir desta figura pode-se observar que a consideração das interações TRI nos cálculos aumenta o valor absoluto do termo fonte de calor radiativo, em concordância com os resultados mostrados nas Tabelas 6.9 e 6.10, os quais serão discutidos mais adiante, nesta mesma seção.

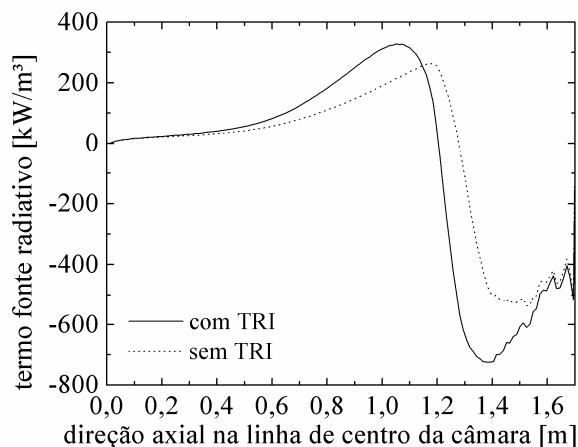


Figura 6.11 - Perfis axiais do termo fonte de calor radiativo ao longo da linha de centro da câmara.

A Fig. 6.12 apresenta perfis ao longo das direções axial e radial para a temperatura média (\bar{T}) e para o somatório da temperatura média com o valor *rms* da flutuação de temperatura ($\bar{T} + \sqrt{T'^2}$). Os perfis de \bar{T} foram obtidos com o cenário de cálculo radiativo que considera as interações TRI, enquanto os perfis de $\bar{T} + \sqrt{T'^2}$ foram pós-processados utilizando os resultados do mesmo cenário. Assim como os resultados mostrados na Fig. 6.10(d), estes resultados contribuem para mostrar a importância da consideração das interações TRI para o cálculo do campo de radiação, uma vez que tais flutuações atingem valores de 50% da temperatura média em alguns pontos do domínio de cálculo, e são empregadas no cálculo das interações TRI.

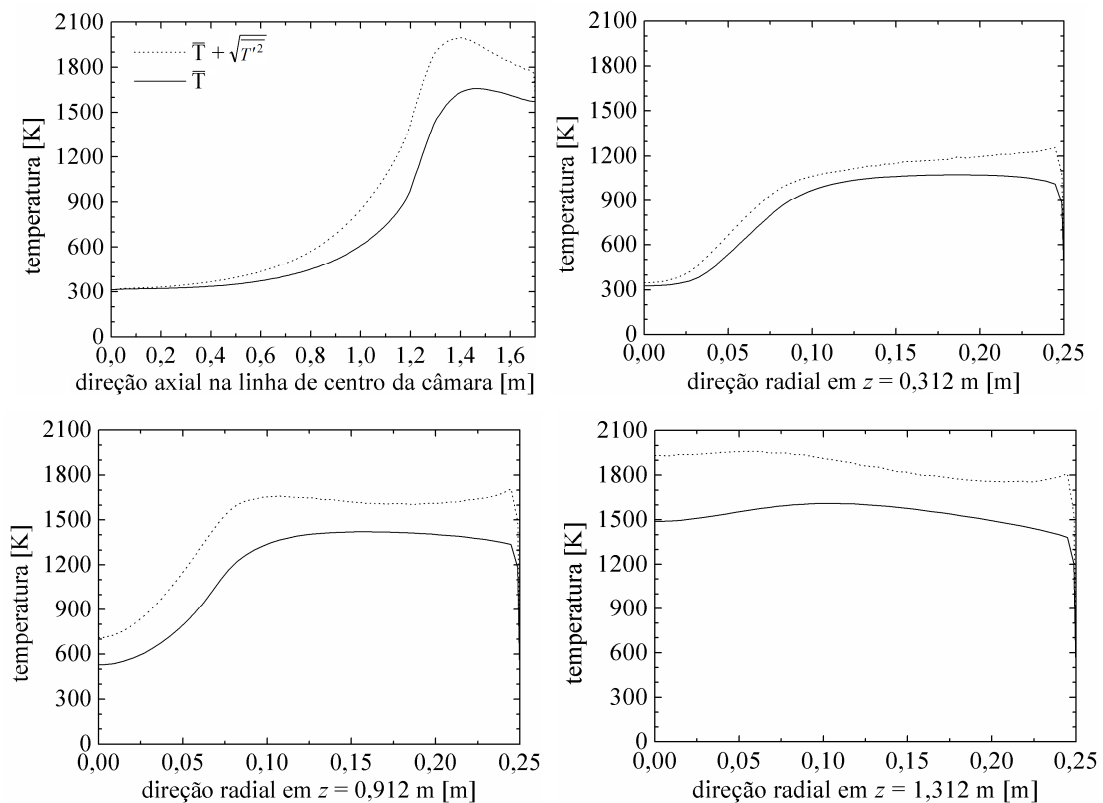


Figura 6.12 - Perfis de temperatura ao longo das direções axial e radial: temperatura média (\bar{T}) e somatório de \bar{T} com o valor *rms* da flutuação de temperatura ($\bar{T} + \sqrt{T'^2}$).

A Fig. 6.13 apresenta os perfis de temperatura e de frações molares de CH₄, CO₂, H₂O, O₂ e de CO ao longo da linha de centro da câmara, e as Figuras 6.14-6.16 mostram os perfis radiais de temperatura e de frações molares de O₂, CO₂, e de H₂O nas posições axiais

$z = 0,312$ m, $z = 0,912$ m, e $z = 1,312$ m a partir da entrada da câmara, respectivamente, considerando os resultados das simulações dos três cenários descritos acima (desprezando a radiação, considerando a radiação com e sem as interações TRI) e ainda mostram os dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994 (dados não disponíveis para H_2O).

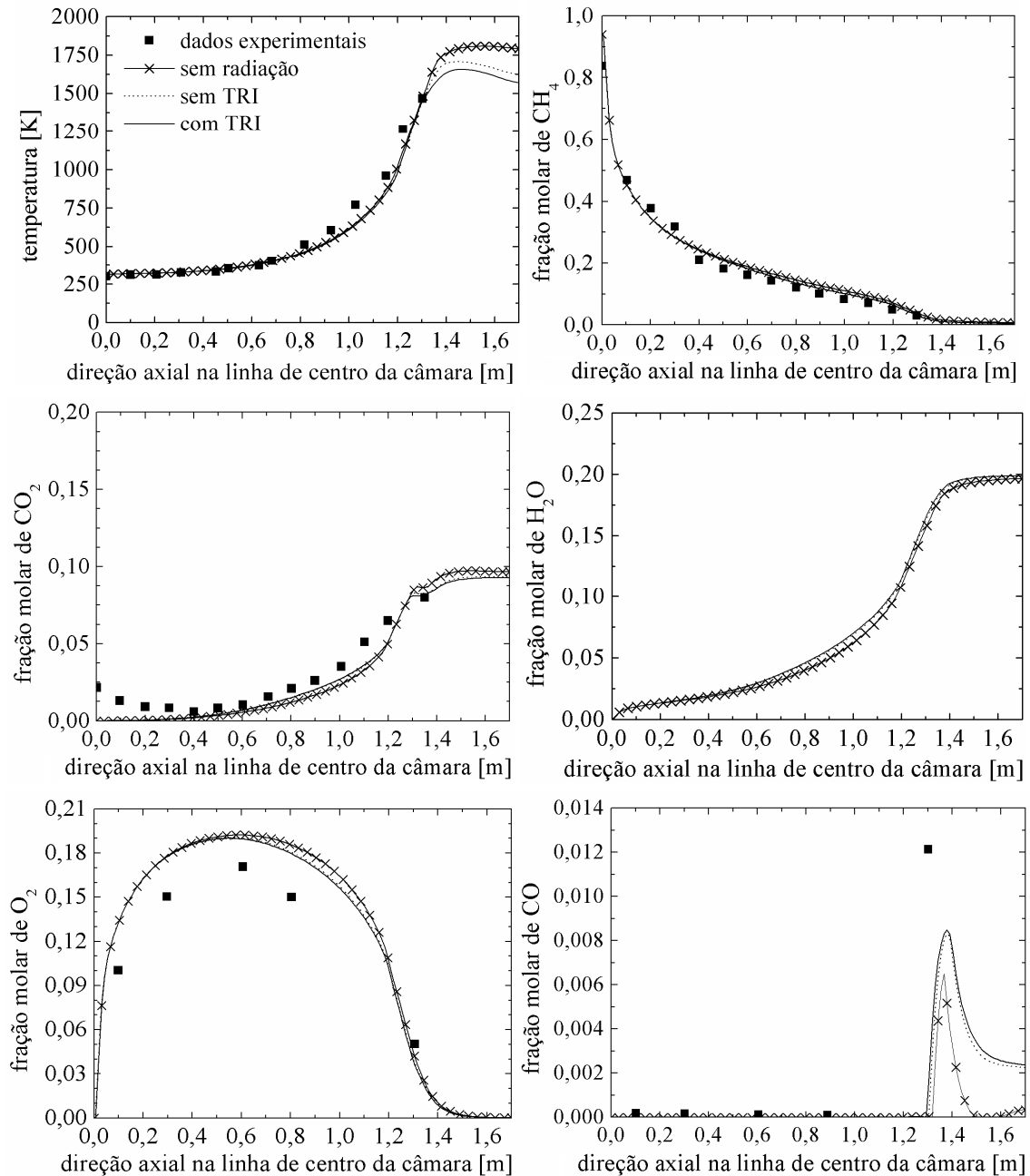


Figura 6.13 - Perfis axiais de temperatura e de frações molares temporais médias de CH_4 , CO_2 , H_2O , O_2 e de CO ao longo da linha de centro da câmara.

Observa-se que os valores de temperatura e gradientes de temperatura foram menores quando a transferência de calor radiativa foi considerada, pois neste caso existia um mecanismo adicional de transferência de calor dentro do domínio computacional. Este comportamento da temperatura e de seus gradientes está em concordância com os resultados de Silva et al., 2007. O mesmo comportamento foi observado comparando os resultados obtidos incluindo ou desprezando as interações TRI, ou seja, uma vez que o cálculo da radiação considerando as interações TRI forneceu um maior termo fonte de calor radiativo do que o cálculo da radiação desprezando as interações TRI, os níveis de temperatura e seus gradientes foram menores quando as interações TRI foram consideradas. A mesma análise pode ser deduzida da Fig. 6.10.

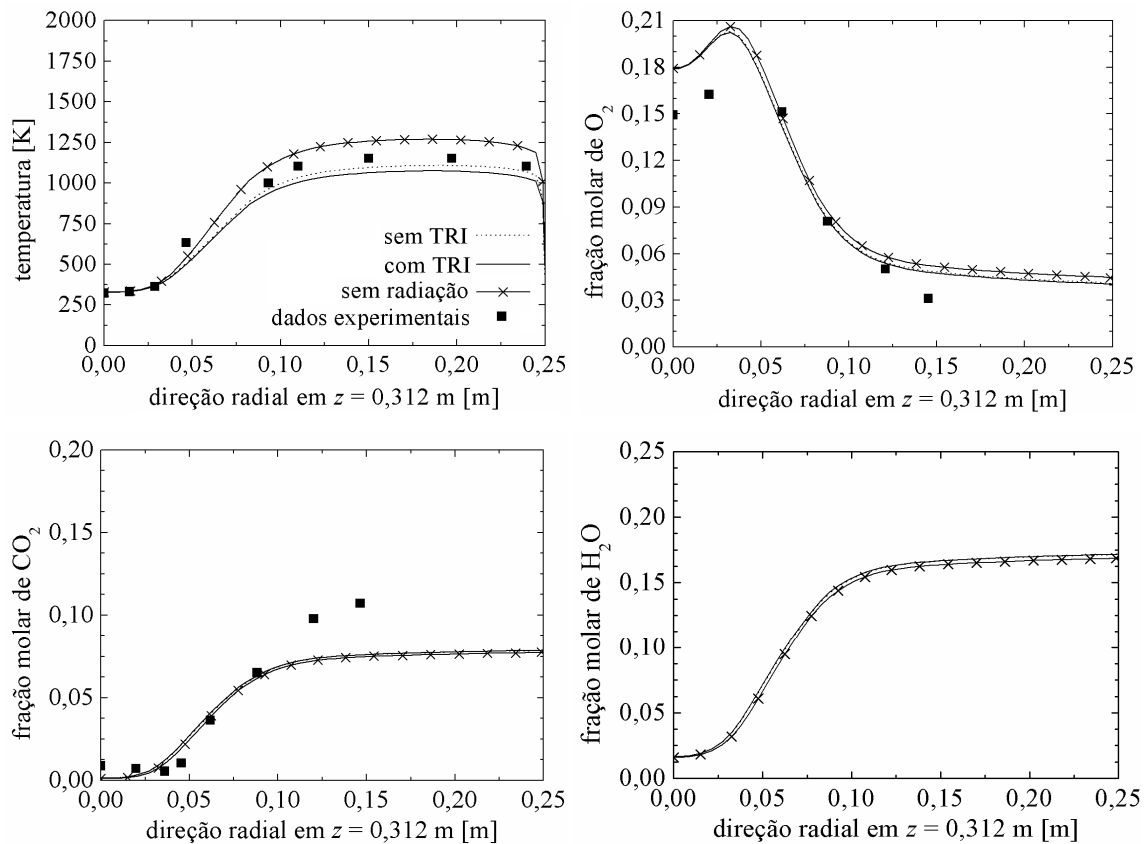


Figura 6.14 - Perfis radiais de temperatura e de frações molares de O_2 , CO_2 , e de H_2O na posição axial $z = 0,312$ m.

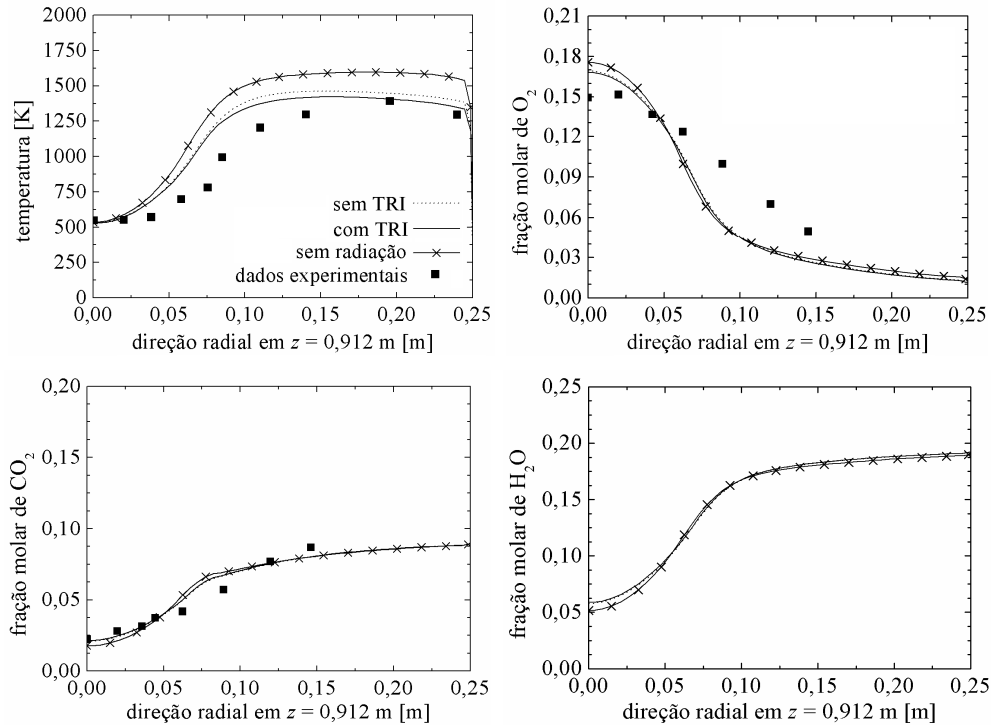


Figura 6.15 - Perfis radiais de temperatura e de frações molares de O_2 , CO_2 , e de H_2O na posição axial $z = 0,912$ m.

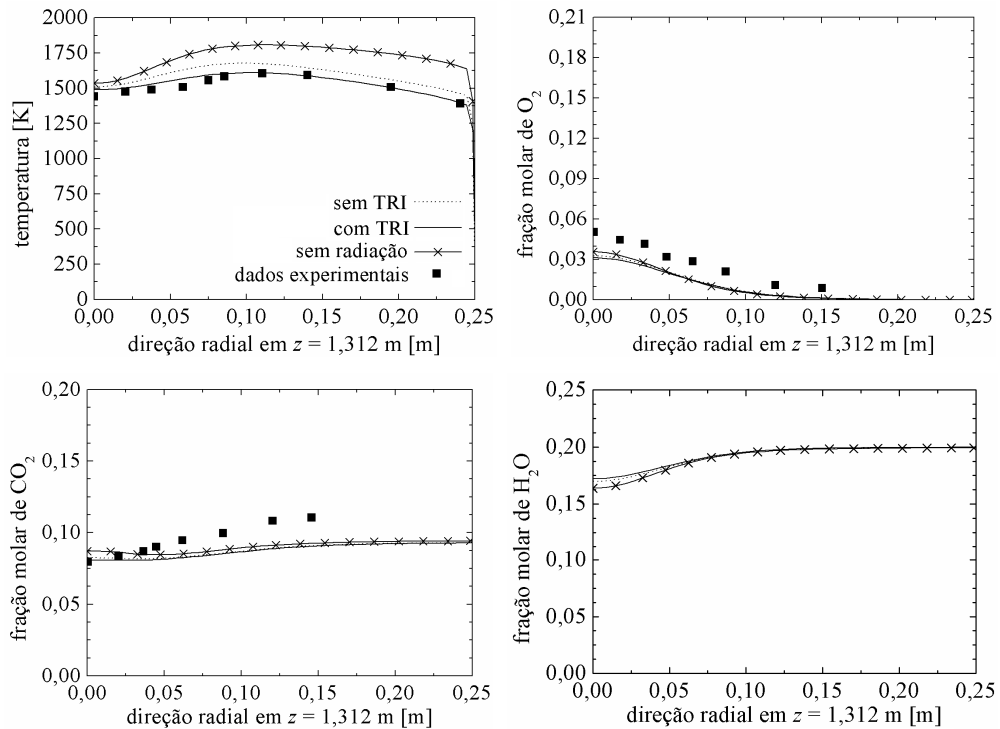


Figura 6.16 - Perfis radiais de temperatura e de frações molares de O_2 , CO_2 , e de H_2O na posição axial $z = 1,312$ m.

Uma vez que as taxas das reações químicas dependem da temperatura, esperava-se que os cálculos de radiação afetassem os cálculos referentes à formação e ao consumo das espécies envolvidas no processo. Apesar disto, as variações médias das frações molares das espécies consideradas, calculadas com os diferentes cenários, foram inferiores a 1,0%, mostrando que as frações molares das espécies foram menos afetadas pelos cálculos da radiação do que foi a temperatura. Isto pode ter sido causado pelo uso de um mecanismo global de cinética química em conjunto com o modelo de combustão E-A, no qual a taxa de reação química é controlada principalmente pela turbulência e, portanto, é menos sensível à temperatura, além de que este tipo de mecanismo não considera espécies químicas secundárias, importantes para o processo de combustão. Outro possível motivo é que as taxas das reações químicas foram calculadas com valores médios de temperatura, desconsiderando os efeitos das flutuações turbulentas sobre a cinética química. Tanto o emprego de mecanismos de cinética química detalhada e/ou outros modelos de combustão, quanto a consideração das interações turbulência-cinética química, constituem avanços na modelagem que podem ser realizados em estudos posteriores a este trabalho.

A Tab. 6.8 apresenta os desvios percentuais médios entre os valores de temperatura obtidos numericamente e aqueles reportados em Garréton e Simonin, 1994. Observa-se que a consideração das interações TRI conduziu aos menores desvios, obtendo assim melhor concordância com os dados experimentais de temperatura. Conforme pode ser observado nas Figuras 6.13-6.16, os diferentes cenários radiativos afetaram marginalmente as frações molares das espécies, sendo os desvios percentuais médios para todos os cenários aproximadamente os mesmos reportados na Seção 6.1. Contudo, as Figuras 6.13-6.16 mostram que, para todos os cenários radiativos, a temperatura e as frações molares das espécies (CO_2 , CH_4 , O_2 e CO) seguem a mesma tendência dos dados experimentais, apesar da discrepância quantitativa. Assim como nos resultados da Seção 6.1, tais diferenças provavelmente tiveram pouca relação com a modelagem da radiação térmica, sendo geradas das limitações dos outros modelos (turbulência, combustão e mecanismo de cinética química) e da complexidade inerente à reprodução do experimento físico.

Tabela 6.8 - Desvios percentuais médios entre os resultados numéricos de temperatura e os dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994, para os três cenários radiativos estudados.

sem radiação [%]	sem TRI [%]	com TRI [%]
12,68	8,36	7,45

Uma visão adicional do efeito da radiação térmica está apresentada na Tab. 6.9, a qual apresenta a taxa de transferência de calor através da parede da câmara.

A consideração da radiação térmica nos cálculos fez um efeito importante no modo de transferência de calor combinado radiação-convecção, levando a um aumento na transferência de calor total de 89,52 kW (somente convecção, para o cenário de cálculo sem transferência de calor por radiação) para 168,47 kW (somatório de convecção e radiação, para o cenário de cálculo que considera as interações TRI). O padrão destes resultados também está em concordância com os resultados de Silva et al., 2007, onde foi mostrado que a transferência de calor através da parede da câmara era aproximadamente duplicada quando a radiação era levada em conta (o efeito das interações TRI não foram considerados nos cálculos naquele trabalho).

É interessante observar que, quando radiação térmica foi considerada, assim como quando as interações TRI foram inseridas nos cálculos, a transferência de calor por convecção diminuiu, uma vez que os gradientes de temperatura na câmara foram reduzidos devido à fonte de calor adicional. Ainda, os resultados mostraram que a transferência de calor radiativa foi maior quando as interações TRI foram consideradas, como esperado, pois o termo fonte de calor radiativo (Figuras 6.10 e 6.11) foi maior neste caso.

Tabela 6.9 - Taxa de transferência de calor na parede cilíndrica da câmara de combustão para os três cenários radiativos estudados.

	taxa somente convecção [kW]	taxa somente radiação [kW]	taxa total (radiação + convecção) [kW]
cenário sem radiação	89,52	0,00	89,52
cenário sem TRI	76,04	83,57	159,61
cenário com TRI	62,18	107,29	168,47

O efeito líquido das interações TRI foi um aumento da emissão de radiação pela chama (conforme visto na Fig. 6.10(f)), e, uma vez que o meio gasoso participante possuía uma espessura óptica relativamente fina-média, uma maior emissão de radiação pela chama levou a um maior fluxo de calor radiativo nas paredes da câmara.

Para todos os cenários radiativos, a taxa líquida de transferência radiativa e a fração radiativa foram calculadas e os resultados estão mostrados na Tab. 6.10. Tanto a taxa líquida

de transferência radiativa, quanto a correspondente fração radiativa, para a chama em estudo possuem valores significativos. Observa-se na Tab. 6.10 que a fração radiativa aumentou aproximadamente 28% quando as interações TRI foram consideradas nos cálculos; este aumento está em concordância com resultados reportados na literatura para chamas de metano-ar [Li e Modest, 2002a, 2002b; Snegirev, 2004; Wang et al., 2008].

Tabela 6.10 - Predições da taxa líquida de transferência radiativa e da fração radiativa.

	taxa radiativa líquida [kW]	f_{rad} [%]
sem TRI	103,25	17,21
com TRI	132,21	21,98

Observando que até este momento esta seção do trabalho estudou os efeitos da turbulência sobre a radiação, outra questão a ser discutida é a influência da radiação sobre a turbulência.

Uma vez que o campo de radiação está presente na equação de conservação de energia como um termo fonte, e que flutuações turbulentas influenciam a transferência radiativa, então a turbulência também influencia os campos de temperatura e propriedades termofísicas, como a massa específica e o calor específico. Assim, tomando como exemplo a massa específica que influencia o campo de velocidades, pode-se concluir que a turbulência deve influenciar a radiação e que a radiação deve influenciar a turbulência.

Pouca atenção tem sido dada na literatura para investigar a influência da radiação sobre a turbulência, provavelmente porque esta influência está relacionada com o acoplamento das equações de conservação (energia, quantidade de movimento, espécies químicas, turbulência, etc.), e seu estudo é mais direto do que o estudo inverso (ou seja, influência da turbulência sobre a radiação). Soufiani, 1991, investigou tal influência em um escoamento em alta temperatura e concluiu que a radiação pode suavizar a intensidade das flutuações de temperatura. Por outro lado, a influência da turbulência sobre a radiação tem recebido muito mais atenção, conforme discutido na Seção 3.6.

Conforme se observa nas Figuras 6.17 e 6.18, os diferentes cenários radiativos investigados no presente trabalho não afetaram de maneira acentuada os campos de propriedades relacionadas com a turbulência, representados nas figuras pelos campos de energia cinética turbulenta das flutuações de velocidade e do valor *rms* das flutuações de

temperatura, respectivamente. Contudo, os campos destas propriedades apresentaram certa suavização ao comparar os resultados obtidos sem considerar a radiação (campo (a) nas Figuras 6.17 e 6.18) com aqueles obtidos considerando a radiação nos cálculos (campos (b) e (c)), em concordância com Soufiani, 1991.

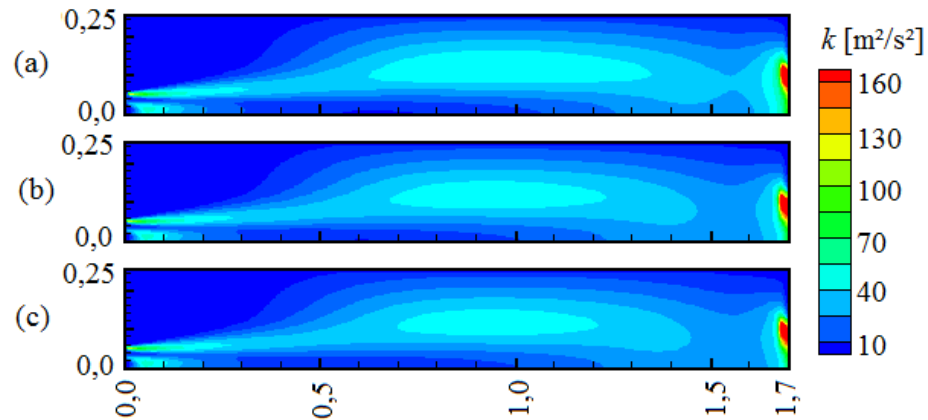


Figura 6.17 - Campos de energia cinética turbulenta para os diferentes cenários radiativos:

(a) sem radiação; (b) radiação calculada sem TRI; (c) radiação calculada com TRI.

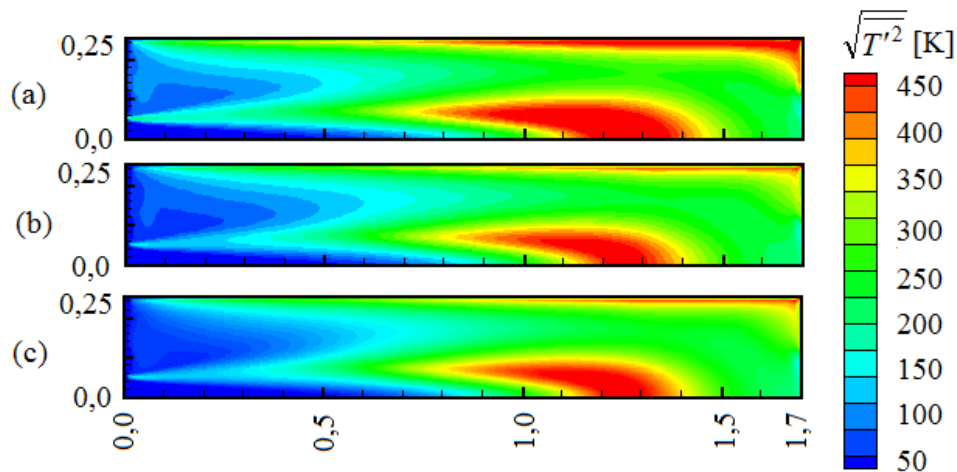


Figura 6.18 - Campos do valor *rms* das flutuações de temperatura, $\sqrt{T'^2}$, para os diferentes

cenários radiativos: (a) sem radiação; (b) radiação calculada sem TRI;

(c) radiação calculada com TRI.

6.3 Contribuição da fuligem para a transferência de calor radiativa

Esta seção apresenta os resultados da simulação numérica de uma chama turbulenta de metano e ar não pré-misturados dentro de uma câmara de combustão cilíndrica, levando em consideração os efeitos da radiação térmica dos gases e da fuligem, ambos com comportamento espectral não-cinza através do modelo WSGG, baseando-se no conjunto de correlações de Dorigon et al., 2013, para os gases, e de Cassol, 2013, para a fuligem, e incluindo ainda os efeitos das interações TRI [Snegirev, 2004].

Desta maneira, objetiva-se avaliar a contribuição da fuligem para a transferência de calor radiativa e conseqüentemente sobre o comportamento térmico global da câmara.

Para avaliação das soluções propostas, estuda-se novamente o caso descrito por Garréton e Simonin, 1994.

Conforme descrito na Seção 6.1, o efeito da não-homogeneidade das concentrações de H₂O e de CO₂ dentro da câmara foi considerado nos cálculos da transferência radiativa, incluindo ainda na presente seção a não-homogeneidade do campo de fuligem.

As simulações foram executadas utilizando o mesmo computador descrito nas seções anteriores. Os cálculos de transferência radiativa foram considerados somente após a solução estar próxima da convergência, e a partir de então, para cada iteração. O tempo de simulação foi de 74 horas, o qual é o dobro do tempo necessário para caso que não considerou a fuligem, apresentado na Seção 6.2. Uma vez que o código CFD necessita resolver o modelo de formação e oxidação de fuligem [Khan e Greeves, 1974; Magnussen e Hjertager, 1977], além de que a ETR necessita ser resolvida para dez gases cinza no modelo WSGG quando se considera a radiação da fuligem e dos gases (ao invés de quatro gases cinza no caso de considerar somente a radiação dos gases), conforme discutido na Seção 3.5, o aumento do custo computacional já era esperado.

Para estudar a contribuição da fuligem sobre a transferência de calor radiativa e sobre o comportamento térmico da câmara, similarmente às seções anteriores, foram considerados três diferentes cenários.

No primeiro cenário, a radiação foi completamente ignorada. No segundo e no terceiro cenários a radiação foi considerada, mas a influência da fuligem sobre a radiação, combinada com a influência dos gases, foi considerada somente para o terceiro cenário, permitindo assim a avaliação da sua contribuição para a transferência de calor radiativa em relação à contribuição somente dos gases, o qual constitui o segundo cenário.

Foram feitas comparações para verificar como e quanto os cenários radiativos afetaram os campos de temperatura e do termo fonte de calor radiativo, assim como as quantidades térmicas, tais como a fração radiativa e o fluxo de calor através das paredes da câmara.

As Figuras 6.19(a) e 6.19(b) mostram os campos do termo fonte de calor radiativo na câmara de combustão para os casos em que o cálculo da radiação térmica considera somente a radiação das espécies gasosas (CO_2 e H_2O) e para o caso em que o cálculo da radiação térmica considera também a radiação da fuligem, respectivamente, enquanto a Fig. 6.19(c) apresenta o desvio encontrado entre os resultados da Fig. 6.19(a) e da Fig. 6.19(b), ou seja, o desvio no termo fonte de calor radiativo resultante de considerar somente a radiação das espécies gasosas ou considerar tanto a radiação das espécies gasosas quanto da fuligem. Este desvio é calculado como,

$$\text{Desvio \%} = 100 \frac{\overline{S}_{rad, gases+fuligem} - \overline{S}_{rad, gases}}{\overline{S}_{rad, gases, máx}} \quad (6.3)$$

Na Eq. (6.3) os subscritos *gases+fuligem* e *gases* indicam quais cenários radiativos foram usados no cálculo de \overline{S}_{rad} .

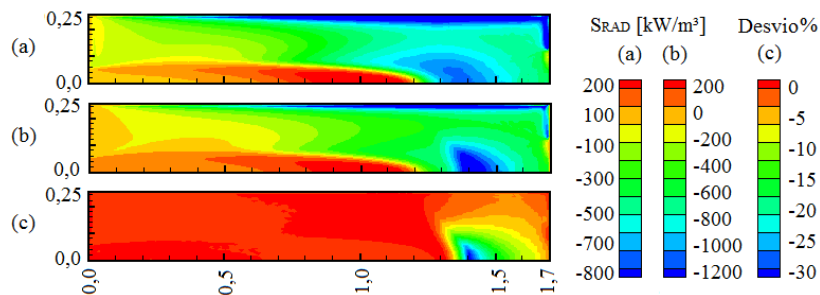


Figura 6.19 - Termo fonte de calor radiativo: (a) com radiação somente dos gases, (b) com radiação da fuligem e dos gases, (c) desvio relativo entre (a) e (b) calculado pela Eq. (6.3).

Observa-se nestas figuras que ambos os campos de radiação apresentaram as mesmas características, mostrando uma região central onde o termo fonte é positivo (região de absorção de radiação), e uma região à jusante onde o termo fonte é negativo (região de

emissão de radiação). Contudo, a consideração da radiação da fuligem conduziu a um aumento significativo no termo fonte na região de emissão de radiação, uma vez que a concentração de fuligem foi mais elevada nesta mesma região, conforme mostrado nas Figuras 6.20(c) e 6.21.

Assim, o efeito de considerar a radiação da fuligem localizou-se em uma região específica da câmara, e conforme mostrado na Fig. 6.19(c), atingiu aumentos na emissão de radiação superiores a 30%, mas somente em uma pequena região, enquanto na maior parte do domínio de cálculo este desvio foi nulo.

A Fig. 6.20 apresenta os campos de frações molares de H₂O e de CO₂, e o campo de fração volumétrica de fuligem, obtidos com o terceiro cenário de cálculo, em que a radiação é considerada incluindo os efeitos radiativos da fuligem, do CO₂ e do H₂O. Estas três espécies químicas, H₂O, CO₂ e fuligem, são as mais importantes para a transferência radiativa na câmara, e por isso foram selecionadas para serem mostradas.

As distribuições de H₂O e CO₂ são aproximadamente iguais àquelas apresentadas na Seção 6.1, possuindo valores da razão x_{H_2O}/x_{CO_2} aproximadamente igual a 2,0 em todo o domínio de cálculo, sendo este dado importante para a correta seleção dos coeficientes do modelo WSGG utilizados na modelagem do coeficiente de absorção da mistura gasosa.

Adicionalmente à Fig. 6.20(c), a Fig. 6.21 apresenta perfis de fração volumétrica de fuligem na linha de centro da câmara e na direção radial na posição $z = 1,4$ m.

Em seu estudo numérico de uma fornalha com queima sem pré-mistura de metano e ar com o objetivo de analisar a influência de condições operacionais sobre a produção de fuligem e, conseqüentemente, analisar o impacto sobre a transferência de calor radiativa para as paredes da fornalha, Al-Omari et al., 2001, encontraram frações volumétricas de fuligem máximas da ordem de 10^{-6} , porém os autores descreveram que os valores máximos encontrados para esta fornalha são maiores do que os valores usualmente encontrados em chamas sem pré-mistura de metano-ar operando em condições similares.

Woolley et al., 2009, investigaram uma chama turbulenta de metano em ar sem pré-mistura, considerando a formação de fuligem através da solução de duas equações de transporte, uma para fração mássica de fuligem e outra para a densidade do número de partículas de fuligem, sendo o acetileno e o benzeno as espécies precursoras responsáveis pela nucleação, em que as concentrações destas espécies foram calculadas usando cinética química detalhada para a fase gasosa. Os autores reportaram valores máximos de fração volumétrica

de fuligem na ordem de 10^{-7} .

Liu et al., 2004, estudaram uma chama laminar de metano em ar sem pré-mistura usando cinética química detalhada para a fase gasosa e modelo de duas equações para a cinética química da fuligem, e obtiveram valores máximos de fração volumétrica de fuligem também na ordem de 10^{-7} .

Brookes e Moss, 1999a, realizaram medições de fuligem em chamas turbulentas de metano e encontraram frações volumétricas máximas da ordem de 10^{-7} .

Mossi et al., 2010b, também encontraram frações volumétricas máximas da ordem de 10^{-7} em seu trabalho sobre efeitos de modelos do coeficiente de absorção dos gases em uma câmara de combustão com chama laminar de metano, empregando cinética química detalhada para os gases e para a fuligem semelhantes aos trabalhos anteriores.

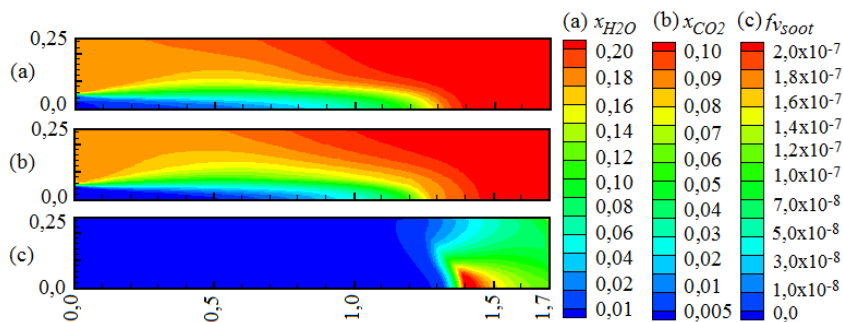


Figura 6.20 - Campos de frações molares de H_2O e de CO_2 , e campo de fração volumétrica de fuligem, obtidos com o terceiro cenário radiativo.

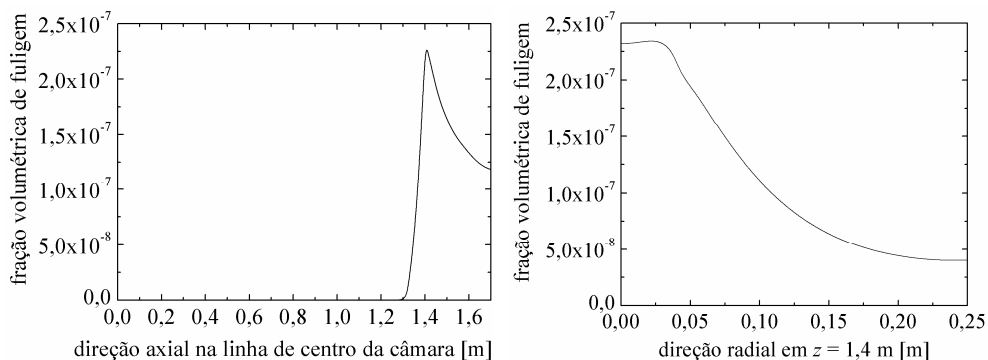


Figura 6.21 - Perfis de fração volumétrica de fuligem na direção axial na linha de centro da câmara e na direção radial na posição axial $z = 1,4$ m, correspondente ao ponto de máxima concentração de fuligem.

Conforme se observa nas Figuras 6.20(c) e 6.21, o campo obtido no presente estudo para a fração volumétrica de fuligem é da ordem de 10^{-7} , em concordância com os campos de fuligem apresentados na literatura, sendo o valor máximo de $2,31 \times 10^{-7}$ na posição próxima à linha de centro da câmara, em $z = 1,4$ m.

A Fig. 6.22 mostra os campos de temperatura obtidos para os três cenários distintos de cálculo: sem considerar radiação (Fig. 6.22(a)), considerando radiação somente com o efeito das espécies gasosas (Fig. 6.22(b)), e considerando radiação com os efeitos das espécies gasosas e da fuligem (Fig. 6.22(c)). A Tab. 6.11 apresenta os valores da temperatura máxima na chama para os três cenários, sendo que tal temperatura reduziu 150 K (redução de 8,3% em relação aos 1809 K) quando a radiação dos gases foi considerada nos cálculos, comparando com o cenário sem radiação, enquanto com a inclusão da fuligem a redução passou para 165 K (redução de 9,1% em relação aos 1809 K).

As diferenças mostradas na Fig. 6.22 e na Tab. 6.11 entre os casos sem radiação e com radiação dos gases reforça a importância de calcular corretamente a transferência radiativa na câmara, enquanto ao comparar os resultados obtidos incluindo ou negligenciando o efeito radiativo da fuligem, tais resultados apresentaram diferenças de menor magnitude, mas também importantes, uma vez que o termo fonte de calor radiativo foi afetado de forma intensa em uma pequena região da câmara, conforme discutido anteriormente.

Assim, a contribuição da fuligem para a redução da temperatura máxima na chama foi de 15 K, a qual, apesar de pequena, não pode ser considerada desprezível.

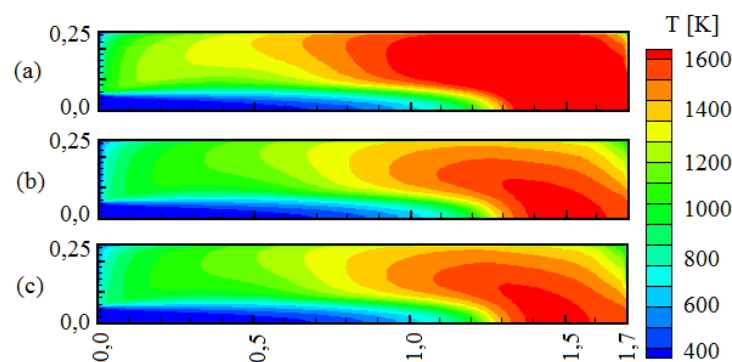


Figura 6.22 - Campos de temperatura: (a) sem radiação; (b) radiação calculada somente com os gases; (c) radiação calculada com gases e fuligem.

Tabela 6.11 - Temperatura máxima na chama para os três cenários radiativos estudados.

	sem radiação	radiação gases	radiação gases e fuligem
T_{max} [K]	1809	1659	1644

A Fig. 6.23 apresenta os perfis de temperatura ao longo da linha de centro da câmara e ao longo da direção radial nas posições axiais $z = 0,312$ m, $z = 0,912$ m, e $z = 1,312$ m a partir da entrada da câmara, considerando os resultados das simulações dos três cenários descritos acima (desprezando a radiação, considerando a radiação somente dos gases, e considerando a radiação dos gases e da fuligem) e ainda mostram os dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994.

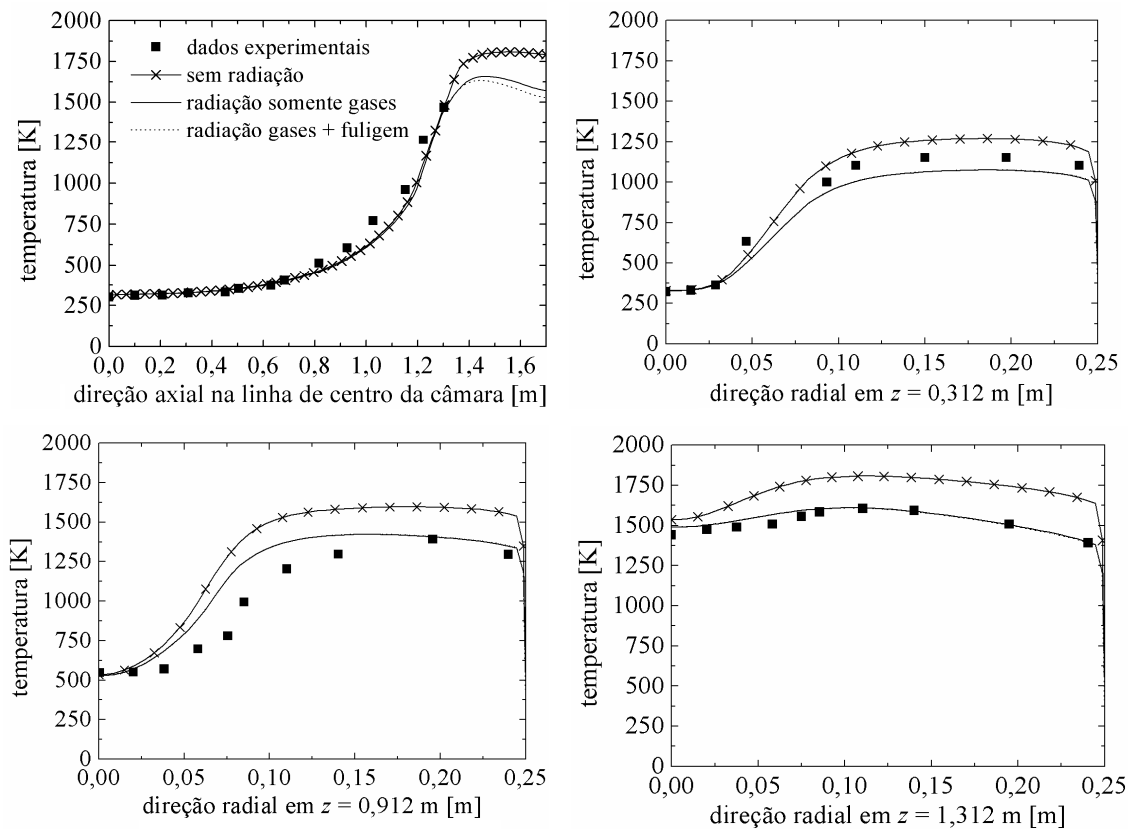


Figura 6.23 - Perfis de temperatura na direção axial ao longo da linha de centro da câmara e na direção radial nas diferentes posições axiais.

Observa-se que os valores de temperatura e gradientes de temperatura foram menores quando a transferência de calor radiativa foi considerada, pois neste caso existia um mecanismo adicional de transferência de calor dentro do domínio computacional. Este comportamento da temperatura e de seus gradientes está em concordância com os resultados de Silva et al., 2007. Contudo, não foi observado o mesmo comportamento ao incluir a contribuição da fuligem para a transferência radiativa, apesar do termo fonte de calor radiativo (Fig. 6.19) ter sido alterado por aquela contribuição. Assim, a consideração da transferência de calor radiativa pela fuligem influenciou apenas marginalmente, e localmente na região de maior emissão de radiação, os perfis de temperatura mostrados na Figura 6.23.

Nas seções anteriores foi mostrado que as concentrações das espécies químicas (CH_4 , CO_2 , H_2O , CO , O_2) foram pouco afetadas pelos diferentes cenários radiativos, enquanto os perfis de temperatura foram influenciados de maneira importante. Na presente seção, as concentrações das espécies químicas sofreram influência desprezível à contribuição da transferência radiativa da fuligem, e por este motivo seus perfis não estão sendo mostrados. Observa-se que os mesmos argumentos expostos nas seções anteriores são válidos para a presente seção, os quais poderiam influenciar no comportamento das concentrações das espécies, ou seja, tanto o emprego de mecanismos de cinética química detalhada e/ou outros modelos de combustão, quanto a consideração das interações turbulência-cinética química, constituem avanços na modelagem que podem ser realizados em estudos posteriores a este trabalho.

Uma análise adicional do efeito da radiação térmica da fuligem e dos gases está apresentada na Tab. 6.12, a qual mostra as taxas de transferência de calor através da parede radial da câmara.

A inclusão de radiação térmica teve um efeito importante na transferência de calor, a qual é dada como o somatório da transferência de calor por radiação e convecção, conduzindo a um aumento na taxa total de transferência de calor de 89,52 kW (quando somente convecção é considerada, para o cenário de cálculo sem radiação) até um máximo de 175,51 kW (somatório de convecção e radiação, para o cenário de cálculo que leva em conta os efeitos radiativos da fuligem e dos gases). O padrão destes resultados também está em concordância com os resultados de Silva et al., 2007, onde foi mostrado que a transferência de calor através da parede da câmara era aproximadamente duplicada quando a radiação era levada em conta (os efeitos das interações TRI e da contribuição da fuligem para a radiação térmica não foram considerados nos cálculos naquele trabalho).

É interessante observar que quando radiação térmica foi incluída nos cálculos, a transferência de calor por convecção decresceu em comparação àquela quando a radiação foi negligenciada, uma vez que os gradientes de temperatura foram menores (como consequência de uma fonte de calor adicional). Ainda, os resultados mostraram que a taxa de transferência de calor radiativa na parede foi aumentada 5,8% (de 107,29 kW para 113,50 kW) quando a radiação da fuligem foi considerada juntamente com a radiação dos gases em relação ao cenário que considerou somente a radiação dos gases, como esperado uma vez que o termo fonte de calor radiativo (Fig. 6.19) foi mais elevado neste caso, mas somente em uma pequena região da câmara de combustão.

Conforme visto na Fig. 6.19, o efeito líquido da contribuição da fuligem foi um aumento da emissão de radiação pela chama, e, uma vez que o meio participante possuía uma espessura óptica relativamente fina-média, uma maior emissão de radiação pela chama levou a um maior fluxo de calor radiativo nas paredes da câmara.

A Fig. 6.24 apresenta o fluxo de calor radiativo sobre a parede radial da câmara de combustão, onde se observa o aumento do fluxo de calor sobre a parede para o caso que considerou a radiação da fuligem, sendo este aumento localizado próximo à região onde existe fuligem (Fig. 6.20(c) e 6.21) e também onde o termo fonte de calor radiativo foi mais elevado (Fig. 6.19). Ainda na Fig. 6.24, observa-se um aumento local máximo de aproximadamente 25% no fluxo de calor radiativo na posição $z = 1,45$ m, estando este aumento local em concordância com o reportado na investigação de Mehta, 2008, para uma chama turbulenta com características semelhantes à da presente chama, tais como tipo de combustível e fração volumétrica máxima de fuligem.

Tabela 6.12 - Taxa de transferência de calor na parede cilíndrica da câmara de combustão para os três cenários radiativos estudados.

	taxa somente convecção [kW]	taxa somente radiação [kW]	taxa total (radiação + convecção) [kW]
cenário sem radiação	89,52	0,00	89,52
cenário com radiação somente gases	62,18	107,29	168,47
cenário com radiação gases + fuligem	62,01	113,50	175,51

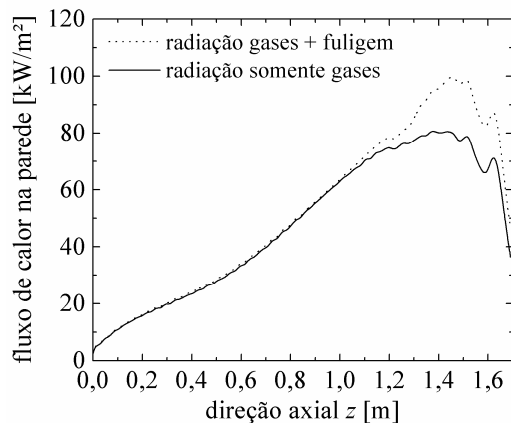


Figura 6.24 - Fluxo de calor radiativo sobre a parede radial da câmara de combustão.

Para todos os cenários radiativos, a taxa líquida de transferência radiativa e a fração radiativa foram calculadas e os resultados estão mostrados na Tab. 6.13. Tanto a taxa líquida de transferência radiativa, quanto a correspondente fração radiativa, para a chama em estudo possuem valores significativos, mostrando a importância do presente estudo.

Observa-se na Tab. 6.13 que a fração radiativa aumentou 8,0% (de 21,98% para 23,72%) quando a radiação da fuligem foi considerada nos cálculos juntamente com a radiação dos gases em relação ao caso que considerou somente a radiação dos gases. Assim como o aumento encontrado na taxa de transferência de calor sobre a parede radial da câmara, este aumento também era esperado devido ao aumento do termo fonte de calor radiativo. Conforme reportado na investigação de Mehta, 2008, para uma chama turbulenta com características semelhantes à da presente chama, as contribuições dos gases e da fuligem para a transferência radiativa correspondem à aproximadamente 90% e 10% do total da radiação, respectivamente, concordando com os resultados da presente análise. Demarco et al., 2013, afirmaram que a transferência radiativa em chamas de metano ou de etano é dominada pela contribuição das espécies gasosas, enquanto a participação da fuligem para a transferência radiativa é dominante somente em chamas de propano, de etileno, ou de acetileno.

Tabela 6.13 - Predições da taxa líquida de transferência radiativa e da fração radiativa.

	taxa radiativa líquida [kW]	f_{rad} [%]
cenário com radiação somente gases	132,21	21,98
cenário com radiação gases + fuligem	142,77	23,72

Comparando os cenários com e sem os efeitos da radiação da fuligem, deve-se observar que o aumento de 8,0% na fração radiativa não correspondeu a um mesmo aumento na taxa de transferência de calor radiativa sobre a parede, a qual apresentou um aumento de 5,8%, sendo esta diferença em decorrência do aumento da espessura óptica do meio, fazendo com que somente uma parcela do aumento da radiação no meio fosse capaz de atingir a parede da câmara.

Estes resultados mostram que, apesar do meio composto pela mistura de gases e fuligem ter sua espessura óptica aumentada em virtude de considerar a fuligem em adição aos gases, ele ainda possui espessura óptica relativamente fina-média, não podendo ser considerado um meio opticamente fino uma vez que parte da radiação é atenuada no meio.

Ainda, poderia se esperar que o aumento da taxa de transferência de calor radiativa sobre a parede fosse menor do que 5,8% como citado anteriormente, uma vez que a fuligem faz com que a espessura óptica seja aumentada, porém deve-se lembrar que as espécies gasosas participam da radiação através de bandas espectrais específicas, enquanto a fuligem, por outro lado, é significativa continuamente através de todo espectro, assim, a radiação contínua da fuligem fora das bandas espectrais sobrepostas às bandas espectrais dos gases enxerga um meio relativamente transparente e escapa sem atenuação adicional.

6.3.1 Avaliação do modelo WSGG em geometria cilíndrica axissimétrica aplicado em meio participante não-isotérmico composto por H₂O, CO₂ e fuligem: comparação com resultados *benchmark* LBL

A influência do emprego do modelo WSGG para a representação do coeficiente de absorção dos gases e da fuligem sobre a transferência de calor por radiação pode ser mais bem avaliada isolando seus efeitos em cálculos separados da radiação e então os comparando com resultados *benchmark* obtidos com o modelo LBL.

Isto pode ser feito congelando-se os campos de frações molares dos gases, fração volumétrica de fuligem, e temperatura, e então calculando-se os campos de radiação usando o modelo WSGG (Dorigon et al., 2013, para os gases, e Cassol, 2013, para a fuligem), assim como o modelo LBL, considerado como *benchmark* devido a sua elevada resolução espectral.

Estes cálculos são desacoplados dos cálculos de escoamento e combustão (referidos como CFD), portanto erros que possam existir devido aos modelos de turbulência e de combustão não influenciam na comparação dos cálculos de radiação.

Este procedimento foi aplicado usando campos convergidos de temperatura, fração molar de CO_2 , fração molar de H_2O , e fração volumétrica de fuligem obtidos da simulação apresentada na Seção 6.3 (Figura 6.20). Deve-se enfatizar que todos os resultados apresentados previamente na Seção 6.3 foram obtidos com cálculos acoplados radiação-CFD.

A Fig. 6.25 apresenta perfis do termo fonte de calor radiativo calculados com os modelos LBL (*benchmark*), e WSGG [Dorigon et al., 2013; Cassol, 2013], ao longo da linha de centro da câmara e ao longo da direção radial da câmara em duas posições axiais ($z = 1,0$ m e $z = 1,5$ m). Os perfis mostrados na Fig. 6.25 foram extraídos do domínio bidimensional com o objetivo de possibilitar uma comparação mais detalhada entre os diversos resultados, o que não é possível de ser realizado comparando-se os campos como aqueles mostrados nas Fig. 6.19 ou na Fig. 6.26, discutida a seguir. Observa-se que o termo fonte de calor radiativo obtido com o modelo WSGG obteve boa concordância com o resultado *benchmark*.

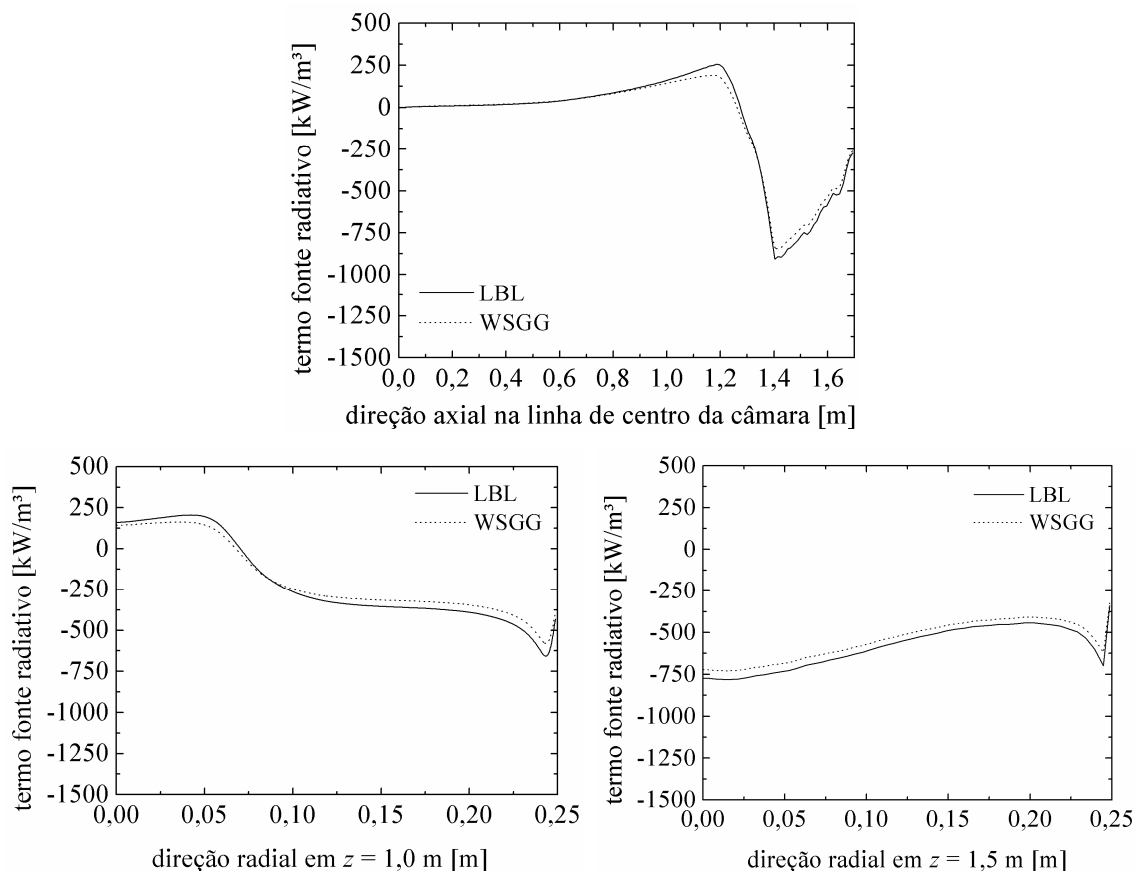


Figura 6.25 - Perfis do termo fonte radiativo calculados com os modelos LBL e WSGG.

A Fig. 6.26(a) apresenta o campo do termo fonte de calor radiativo *benchmark*, obtido com o modelo LBL. Com o objetivo de avaliar o modelo WSGG de maneira quantitativa, a Fig. 6.26(b) apresenta o campo de distribuição do erro relativo percentual, calculado como,

$$Erro \% = 100 \frac{|\bar{S}_{rad, LBL} - \bar{S}_{rad, WSGG}|}{\bar{S}_{rad, LBL, máx}} \quad (6.4)$$

onde o subscrito “LBL” refere-se ao resultado *benchmark*, e o subscrito “WSGG” refere-se ao resultado obtido com o modelo WSGG.

Após o cálculo do termo fonte de calor radiativo empregando cada um dos modelos, utilizando para todos os cálculos campos fixos de frações molares dos gases, fração volumétrica de fuligem e de temperatura, a Eq. (6.4) é aplicada em todo o domínio de cálculo, obtendo-se assim o resultado apresentado na Fig. 6.26(b). Este resultado mostra que o erro entre os resultados do modelo WSGG e do LBL possuem valores significativos somente em uma pequena região do domínio de cálculo, possuindo valores inferiores ao caso que considerou somente a radiação dos gases, apresentado na Fig. 6.9(c), sendo que na maior parte do domínio o erro é bastante pequeno.

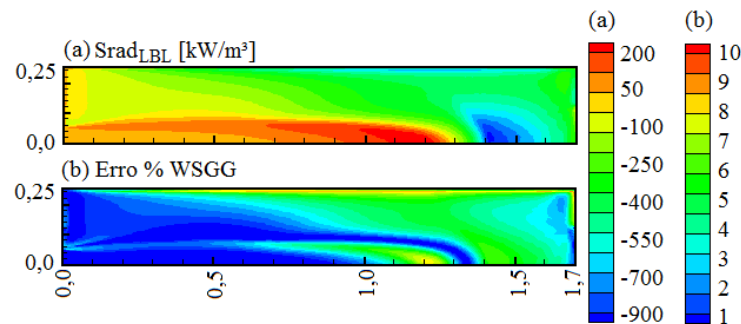


Figura 6.26 - Comparação entre os resultados obtidos para o campo do termo fonte radiativo: (a) termo fonte radiativo obtido com o modelo LBL, (b) erro relativo percentual entre o termo fonte radiativo obtido com o modelo LBL e o modelo WSGG.

A Tab. 6.14 apresenta os erros relativos percentuais máximo e médio, e o desvio padrão do erro, considerando o cenário apresentado na Fig. 6.26(b), que considera a radiação dos gases e da fuligem, e o cenário apresentado na Fig. 6.9(c), que considerou somente a

radiação dos gases. A Tab. 6.14 também mostra o percentual de volumes de controle com erros relativos superiores a 10%, para ambos os cenários.

Mossi et al., 2012, aplicaram o modelo WSGG com as correlações de Smith et al., 1982 e 1987, para o cálculo da transferência de calor radiativa em um meio participante composto por misturas de H₂O, CO₂ e fuligem em uma geometria unidimensional, comparando os resultados com soluções LBL. Os autores consideraram o meio não-isotérmico e com concentrações uniformes de gases e de fuligem. Para frações volumétricas de fuligem de 10⁻⁷, os resultados indicaram erro relativo máximo de 44,7% e médio de 26,9%.

Cassol, 2013, empregou a base de dados espectrais HITEMP 2010 no cálculo da transferência de calor radiativa em problemas unidimensionais composto por meio não-isotérmico e não-homogêneo (CO₂, H₂O e fuligem), empregando os modelos SLW, CW, WSGG e GC, os quais tiveram seus resultados comparados a solução *benchmark* (LBL). Para as condições térmicas e concentrações de espécies consideradas, o modelo WSGG forneceu os melhores resultados para os termos fonte de calor radiativo para as situações em que o meio foi considerado composto por gases (10% de CO₂ e 20% de H₂O) e fuligem (fração volumétrica de 1×10⁻⁷), apresentando erros máximo e médio de 7,74% e 2,96%, respectivamente.

Os erros do modelo WSGG apresentados na Fig. 6.26(b) e na Tab. 6.14 podem ser considerados satisfatórios, uma vez que os casos estudados na literatura empregaram geometrias mais simplificadas (unidimensionais), e o caso cilíndrico axissimétrico estudado no presente trabalho apresenta desafios muito mais complexos do que o caso unidimensional quando se trata da modelagem da radiação, devido aos gradientes de temperatura e de concentrações das espécies químicas.

Para o modelo WSGG empregando a mistura de gases e fuligem, somente 0,1% dos volumes de controle do domínio computacional apresentaram erros superiores a 10%, enquanto que ao empregar este modelo somente para gases, esta quantidade foi de 17%.

O caso que considerou radiação dos gases e da fuligem apresentou erro relativo máximo de 11,07% e médio de 2,95%, sendo que 99,9% dos volumes de controle apresentaram erro relativo inferior a 10%.

Esta melhoria no resultado está relacionada com a menor dificuldade em modelar o comportamento espectral da fuligem devido a sua natureza linear, em contraste com o comportamento dos gases que é altamente não-linear ao longo do espectro, dificultando a sua

modelagem. No caso em que foi considerada a radiação somente dos gases, os maiores erros foram na região de emissão de radiação (Fig. 6.9(c)), a qual é a mesma região onde a fuligem estava localizada na chama (Fig. 6.20(c)), fazendo com que o cálculo da radiação se aproximasse do resultado *benchmark* naquela região para o caso que considerou a radiação dos gases e da fuligem, conseqüentemente, reduzindo os erros.

Tabela 6.14 - Erros máximos e médios do termo fonte radiativo do modelo WSGG em relação ao resultado *benchmark* (LBL), para os cenários de cálculo radiativo com e sem a participação da fuligem.

	Erro máximo %	Erro médio %	Desvio padrão do Erro %	% de volumes com Erro > 10%
WSGG somente gases	22,49	4,72	5,59	17,0
WSGG gases e fuligem	11,07	2,95	2,04	0,1

7 CONCLUSÕES

Este trabalho apresentou simulações numéricas de uma chama turbulenta de metano e ar não pré-misturados em uma câmara cilíndrica, com o objetivo de estudar a influência da radiação térmica.

O sistema físico escolhido para ser analisado no presente trabalho consistiu na câmara de combustão descrita por Garréton e Simonin, 1994, por apresentar diversos desafios para a modelagem da radiação térmica, uma vez que a chama é turbulenta e o meio participante é altamente não-isotérmico e não-homogêneo, além da disponibilidade de medições detalhadas das distribuições espaciais das principais espécies gasosas e da temperatura.

Os efeitos radiativos dos gases e da fuligem foram considerados pelos modelos WSGG e GC, levando em consideração ainda a influência das interações TRI sobre a transferência de calor radiativa. Utilizando campos convergidos de temperatura, frações molares de H₂O e de CO₂, e fração volumétrica de fuligem, este trabalho também realizou cálculos utilizando o modelo LBL, baseado no banco de dados espectrais mais recente disponível na literatura, o HITEMP 2010 [Rothman et al., 2010], sendo este modelo considerado como *benchmark* para a representação das propriedades radiativas do meio participante, com o objetivo de estimar o erro introduzido nas soluções das simulações ao empregar-se os modelos WSGG e GC.

As simulações numéricas foram realizadas utilizando o método de volumes finitos para a solução das equações de conservação de massa, quantidade de movimento, espécies químicas, energia, e variância das flutuações de temperatura. Foi utilizado um mecanismo de reação com dois passos para as espécies gasosas com o modelo de combustão *Eddy Breakup* – Arrhenius para cálculo das taxas de reação, e o campo de fuligem foi calculado através dos modelos de formação de Khan e Greeves, 1974, e de oxidação de Magnussen e Hjertager, 1977. Para modelagem da turbulência foi empregado o modelo *k-ε* padrão. O método de ordenadas discretas (DOM) foi empregado para resolver a equação de transferência radiativa (ETR).

Este trabalho mostrou a importância de boas previsões da transferência de calor por radiação em problemas de combustão.

Primeiramente, foram considerados os efeitos da radiação térmica dos gases H₂O e CO₂ através do modelo WSGG, baseando-se nas correlações clássicas de Smith et al., 1982, e nas novas correlações de Dorigon et al., 2013, geradas a partir do banco de dados espectrais HITEMP 2010, e através do modelo GC baseando-se nas correlações de Cassol et al., 2014,

também geradas a partir do banco de dados HITEMP 2010. Nesta parte do trabalho, o objetivo era avaliar a influência das diferentes correlações dos modelos de propriedades radiativas dos gases sobre a radiação e conseqüentemente sobre o comportamento térmico global da câmara.

A comparação dos resultados obtidos com os diferentes modelos para as propriedades radiativas dos gases participantes, modelos WSGG e GC, mostraram que os campos de temperatura e do termo fonte de calor radiativo, assim como a transferência de calor para a parede da câmara e a fração radiativa, foram sensíveis aos diferentes modelos, enquanto o efeito sobre as concentrações das espécies foi de menor relevância, para o modelo de combustão considerado. Uma vez que o termo fonte radiativo sofreu alteração significativa, pode-se concluir que é muito importante utilizar um modelo confiável de radiação nas simulações para que seja possível obter bons resultados para o campo de temperatura na câmara e para a transferência de calor para as paredes da câmara.

Os resultados numéricos obtidos com o modelo WSGG mais recente [Dorigon et al., 2013] ficaram mais próximos dos dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994, do que os resultados obtidos com o modelo WSGG clássico [Smith et al., 1982] ou com o modelo GC [Cassol et al., 2014].

O efeito da não-homogeneidade das concentrações de H_2O e CO_2 dentro da câmara de combustão sobre a transferência de calor radiativa foi investigado, mostrando que este efeito não deve ser desprezado no cálculo da radiação térmica, pois a sua influência conduziu a um aumento de 10% no campo de radiação na chama.

Através do emprego de campos fixos de temperatura e de frações molares de H_2O e de CO_2 , foi estimado o erro do cálculo do campo de radiação na chama devido a utilização dos modelos WSGG e GC nas simulações, comparando os seus resultados com a solução *benchmark*, o modelo LBL. O tempo computacional para os modelos WSGG e GC foi da ordem de 1 segundo, enquanto o modelo LBL precisou de 13 horas para fornecer uma solução do campo de radiação na chama, demonstrando a importância dos modelos globais para aplicações em simulação numérica de combustão. Entre os modelos avaliados, o modelo WSGG de Dorigon et al., 2013, foi o que apresentou os resultados mais próximos da solução *benchmark*.

Considerando os resultados obtidos com os diferentes modelos de propriedades radiativas dos gases, o modelo WSGG de Dorigon et al., 2013, foi o que apresentou os melhores resultados, sendo então o modelo escolhido para ser empregado na demais análises

que foram realizadas no presente trabalho.

Em seguida, o estudo foi dirigido à influência das interações TRI sobre a transferência radiativa, as quais foram contabilizadas no cálculo da ETR utilizando a metodologia proposta em Snegirev, 2004, a qual permite a consideração da autocorrelação de temperatura e da correlação entre o coeficiente de absorção e a temperatura.

Nesta parte do trabalho, o estudo foi realizado por meio de três cenários: radiação desprezada dos cálculos, e radiação considerada com e sem os efeitos das interações TRI.

A comparação dos resultados obtidos a partir dos diferentes cenários mostrou que a temperatura (especialmente a região de alta temperatura), o termo fonte de calor radiativo, a transferência de calor para a parede da câmara, e a fração radiativa foram importantemente afetadas pelos diferentes cenários, enquanto a radiação teve importância secundária na predição das concentrações das espécies químicas para o modelo de reação química adotado.

Os resultados numéricos que consideraram a radiação na análise foram mais próximos dos dados experimentais de Garréton e Simonin, 1994, quando comparados com o caso que a negligenciou, enquanto a inclusão das interações TRI tornaram os resultados ainda mais próximos aos dados experimentais.

A inclusão das interações TRI nos cálculos teve uma influência importante sobre resultados globais, tais como temperatura máxima e fração radiativa, em concordância com resultados reportados na literatura para simulações de radiação com interações TRI de chamas de metano-ar [Li e Modest, 2002a, 2002b; Snegirev, 2004; Coelho, 2007].

Para completar a investigação, o campo de fuligem foi calculado, tornando possível a consideração dos efeitos radiativos da mistura de gases e fuligem, utilizando o modelo WSGG com novas correlações (gases: Dorigon et al., 2013, fuligem: Cassol, 2013) e incluindo também os efeitos das interações TRI [Snegirev, 2004]. O campo de fuligem foi calculado através dos modelos de formação de Khan e Greeves, 1974, e de oxidação de Magnussen e Hjertager, 1977.

Este trabalho mostrou a importância de considerar a fuligem juntamente com a mistura gasosa sobre a radiação térmica na câmara de combustão comparando os resultados obtidos considerando a radiação térmica somente das espécies gasosas com aqueles obtidos considerando o efeito combinado da radiação térmica dos gases e da fuligem.

A modelagem da cinética química de formação e oxidação da fuligem empregada mostrou-se viável para o presente estudo, sem a necessidade de ajustes nos seus coeficientes, apresentando demanda computacional aceitável, e os resultados obtidos do campo de fração

volumétrica de fuligem estando em concordância com dados para outras chamas de metano-ar disponíveis na literatura [Woolley et al., 2009; Liu et al., 2004; Mossi et al., 2010b], considerando-se assim que esta modelagem da fuligem foi satisfatória para a análise que se propõe.

A influência de considerar os efeitos radiativos da fuligem juntamente com os efeitos dos gases foi mais importante sobre o termo fonte de calor radiativo na região da câmara onde a fuligem estava presente, com aumento de até 30% em relação ao caso em que foram considerados somente os efeitos dos gases, afetando de forma desprezível nas demais regiões.

O fluxo de calor radiativo sobre a parede radial da câmara de combustão apresentou um aumento local de aproximadamente 25% na região de maior concentração de fuligem. A contribuição dos gases e da fuligem para a transferência radiativa foi de 92% e 8%, respectivamente. Estes resultados estão em concordância com o reportado na investigação de Mehta, 2008.

A contribuição da radiação da fuligem para a concordância dos resultados numéricos com os dados experimentais [Garréton e Simonin, 1994] foi de importância secundária.

Através do emprego de campos fixos de temperatura, de frações molares de H₂O e de CO₂, e de fração volumétrica de fuligem, foi estimado o erro do cálculo do campo de radiação na chama devido à utilização do modelo WSGG nas simulações, comparando os seus resultados com a solução *benchmark*, o modelo LBL. Em relação ao caso que considerou somente a radiação dos gases, o modelo WSGG apresentou melhorias na predição do campo de radiação quando empregado à mistura de gases e fuligem, pois neste caso apresentou erro relativo médio e erro relativo máximo menores (2,95% e 11,07%, respectivamente), e somente 0,1% dos volumes de controle apresentaram erro relativo superior a 10%, enquanto no primeiro caso este valor foi de 17%.

7.1 Sugestões de trabalhos futuros

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

- Emprego de outros modelos de combustão para o cálculo das taxas das reações químicas que sejam capazes de considerar as interações entre turbulência e cinética química;
- Emprego de mecanismo de reação detalhado para a cinética química das espécies gasosas, incluindo a consideração de espécies secundárias e radicais;
- Emprego de outros modelos para a formação/oxidação de fuligem;

- Emprego de metodologia LES para solução do escoamento turbulento;
- Emprego de modelos de propriedades radiativas que permitam a participação das espécies químicas CO e CH₄, as quais, apesar de aparecerem em pequena quantidade na chama, podem contribuir para a transferência de calor radiativa;
- Acoplamento do modelo de propriedades radiativas LBL ao código CFD (depende de avanços em capacidade computacional);
- Utilização do código computacional desenvolvido como ferramenta para otimizar as condições operacionais da câmara de combustão;
- Aplicação do código computacional desenvolvido como ferramenta para a solução de outros problemas (geometrias, aplicações, etc.), incluindo casos em que a convecção mista seja importante.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Al-Omari, S.B., Kawajiri, K., Yonesawa, T., 2001. “Soot processes in a methane-fueled furnace and their impact on radiation heat transfer to furnace walls”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 44, pp. 2567 - 2581.

Amani, E., Nobari, M.R.H., 2010. “An efficient PDF calculation of flame temperature and major species in turbulent non-premixed flames”, **Applied Mathematical Modelling**, vol. 34, pp. 2223-2241.

Amin M, Foster P.J., 1973. “Fluctuations in the transmittance of a turbulent propane jet flame”, **European Symposium on Combustion**, pp. 530- 535.

Auzillon, P., Fiorina, B., Vicquelin, R., Darabiha, N., Gicquel, O., Veynante D., 2011. “Modeling chemical flame structure and combustion dynamics in LES”, **Proceedings of the Combustion Institute**, vol. 33, pp. 1331-1338.

Barlow, R.S., Frank, J.H., 1998. “Effects of turbulence on species mass fractions in methane-air jet flames”, **Anais do 27th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute**, pp. 1087–1095.

Barlow, R.S., Karpetsis, A.N., Frank, J. H., 2001. “Scalar profiles and NO formation in laminar opposed-flow partially premixed methane/air flames”, **Combustion and Flame**, vol. 127, pp. 2102-2118.

Barreiros, A., 2001. “The radiation interaction with the turbulent temperature fluctuations in high radiating non-premixed flames”, **Computational Heat and Mass Transfer**, vol. 1, pp. 88-95.

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

Becker H.A., 1975. "Effects of concentration fluctuations in turbulent diffusion flames", **Anais do 15th Symposium (International) on Combustion**, Pittsburgh, pp. 601 - 615.

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

Beji, T., Zhang, J., Delichatsios, M.A., 2008. "Determination of soot formation rate from laminar smoke point measurements", **Combustion Science and Technology**, vol. 180, n. 5, pp. 927-940.

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

Bisetti, F., Blanquart, G., Mueller, M.E., Pittchm H., 2012. "On the formation and early evolution of soot in turbulent nonpremixed flames", **Combustion and Flame**, vol. 159, pp. 317-335.

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

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

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

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

Brookes, S.J., Moss, J.B., 1999a. "Measurements of soot production and thermal radiation from confined turbulent jet diffusion flames of methane", **Combustion and Flame**,

vol. 116, pp. 49-61.

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

Bulat, G., Jones, W.P., Marquis, A.J., 2014. “NO and CO formation in an industrial gas-turbine combustion chamber using LES with the Eulerian sub-grid PDF method”, **Combustion and Flame**, dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2013.12.028.

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

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

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

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

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

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

- Chandrasekhar, S., 1960. **Radiative transfer**, Dover Publications.
- Cheung, S.C.P., Yuen, R.K.K., Yeoh, G.H., Cheng, G.W.Y., 2004. "Contribution of soot particles on global radiative heat transfer in a two-compartment fire", **Fire Safety Journal**, vol. 39, pp. 412–428.
- Chou, P.Y., 1945. "On the velocity correlations and the solution of the equations of turbulent fluctuation", **Quarterly of Applied Mathematics**, vol. 3, pp. 38.
- Christo, F.C., Dally, B.B., 2005. "Modeling turbulent reacting jets issuing into a hot and diluted coflow", **Combustion and Flame**, vol. 142, pp. 117-129.
- Chu, H., Liu, F., Zhou, H., 2012. "Calculations of gas radiation heat transfer in a two-dimensional rectangular enclosure using the line-by-line approach and the statistical narrow-band correlated- k model", **International Journal of Thermal Sciences**, vol. 59, pp. 66-74.
- Coelho P.J., 2002. "Evaluation of a model for turbulence/radiation interaction in flames using a differential solution method of the radiative transfer equation", **12th international heat transfer conference**, Grenoble, France, pp. 705 - 710.
- Coelho P.J., 2004. "Detailed numerical simulation of radiative transfer in a non-luminous turbulent jet diffusion flame", **Combustion and Flame**, vol. 136, pp. 481 - 492.
- Coelho, P.J., 2007. "Numerical simulation of the interaction between turbulence and radiation in reactive flows", **Progress in Energy and Combustion Science**, vol. 33, pp. 311 - 383.
- Coelho, P.J., 2012. "Turbulence–Radiation Interaction: From Theory to Application in Numerical Simulations", **Journal of Heat Transfer**, vol. 134, pp. 1-13.
- Coelho P.J., 2013. "A theoretical analysis of the influence of turbulence on radiative emission in turbulent diffusion flames of methane", **Combustion and Flame**, vol. 160, pp.

610 - 617.

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

Coelho, P.J., Teerling, O.J., Roekaerts, D., 2003. "Spectral radiative effects and turbulence/radiation interaction in a non-luminous turbulent jet diffusion flame", **Combustion and Flame**, vol. 133, pp. 75 - 91.

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

Crnomarkovic, N., Sijercic, M., Belosevic, S., Tucakovic, D., Zivanovic, T., 2013. "Numerical investigation of processes in the lignite-fired furnace when simple gray gas and weighted sum of gray gases models are used", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 56, pp. 197 – 205.

Cuoci, A., Frassoldati, A., Buzzi Ferraris, G., Faravelli, T., Ranzi, E., 2007. "The ignition, combustion and flame structure of carbon monoxide/hydrogen mixtures. Note 2: Fluid dynamics and kinetic aspects of syngas combustion", **International Journal of Hydrogen Energy**, vol. 32, pp. 3486-3500.

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

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

Demarco, R., Nmira, F., Consalvi, J.L., 2013. "Influence of thermal radiation on soot

production in laminar axisymmetric diffusion flames”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 120, pp. 52-69.

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

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

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

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

Deshmukh, K.V., Haworth, D.C., Modest, M.F., 2008. “Direct numerical simulation of turbulence-radiation interactions in a statistically one-dimensional non-premixed system”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 109, pp. 2391-2400.

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

Dos Santos, E D., Galarça, M.M., Mossi, A.C., Petry, A.P., França, F.H.R., 2009. “A numerical study of the influence of temperature fluctuations in the thermal radiation field”, **Engenharia Térmica**, vol. 8, pp. 51-57.

Dos Santos, E D., Isoldi, L.A., Petry, A.P., França, F.H.R., 2014. “A numerical study of the combined convective and radiative heat transfer in non-reactive turbulent channel flows

with several optical thicknesses: a comparison between LES and RANS”, **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, vol. 36, pp. 207-219.

Duciak, G., Brittes, R., Cassol, F., Centeno, F.R., França, F.H.R., 2013. “WSGG model evaluation in a strongly non-isothermal and inhomogeneous medium composed of CO₂ and H₂O”, **Anais do 22th Brazilian Congress of Mechanical Engineering**, Ribeirão Preto, SP, Brazil.

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

Edge, P., Gubba, S.R., Ma, L., Porter, R., Pourkashanian, M., Williams, A., 2011. “LES modelling of air and oxy-fuel pulverized coal combustion – impact on flame properties”, **Proceedings of the Combustion Institute**, vol. 33, pp. 2709-2716.

Fairweather, M., Jones, W.P., Ledin, H.S., Lindstedt, R.P., 1992. “Predictions of soot formation in turbulent non-premixed propane flames”, **Anais do 24th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Inst.**, pp. 1067-1074.

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

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

Fleck, J.A., 1961a. “The calculation of nonlinear radiation transport by a Monte Carlo method”, **Technical Report UCRL-7838, Lawrence Radiation Laboratory**.

Fleck, J.A., 1961b. “The calculation of nonlinear radiation transport by a Monte Carlo method: Statistical physics”, **Methods in Computational Physics**, vol. 1, pp. 43-65.

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

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

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

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

Germano, M., 1978. "Turbulent fluctuations coupled with the radiation field", **AIAA paper**, vol. 78, pp. 780 - 840.

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

Santos, R.G., Lecanu, M., Ducruix, S., Gicquel, O., Diacona, E., Veynante, D., 2008. "Coupled Large Eddy Simulations of turbulent combustion and radiative heat transfer", **Combustion and Flame**, vol. 152, pp. 387-400.

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

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

Guedri, K., Borjini, M.N., Jeguirim, M., Brilhac, J., Saïd, R., 2011. "Numerical study of radiative heat transfer effects on a complex configuration of rack storage fire", **Energy**, vol.

36, pp. 2984-2996.

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

Habibi, A., Merci, B., Roekaerts, D., 2007a. "The importance of Turbulence-Radiation Interaction in RANS simulations of a turbulent non-premixed laboratory-scale bluff-body flame", **3rd European Combustion Meeting**, Crete, Grécia.

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

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

Harmandar, S., Selçuk, N., 2004. "The method of lines solution of discrete ordinates method for radiative heat transfer in cylindrical enclosures", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 84, pp. 395-407.

Hartmann, J. M., Leon, R. L., Taine, J., 1983, "Line-by-line and narrow-band statistical model calculations for H₂O", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 32, pp. 119-127.

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

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

Hottel, H.C., Cohen, E.S., 1958. "Radiant heat exchange in a gas-filled enclosure: allowance for nonuniformity of gas temperature", **AIChE Journal**, vol. 4, pp. 3-14.

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

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

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

Ihme, M., Pitsch, H., 2008. "Modeling of radiation and nitric oxide formation in turbulent nonpremixed flames using a flamelet/progress variable formulation", **Physics of Fluids**, vol. 20, 055110.

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

Jean, J.H., 1917. "The equations of radiative transfer of energy", **Monthly Notices Royal Astronomical Society**, vol. 78, pp. 28-36.

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

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

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

Kassem, H.I., Saqr, K.M., Aly, H.S., Sies, M.M., Wahid, M.A., 2011. "Implementation of

the eddy dissipation model of turbulent non-premixed combustion in OpenFOAM”, **International Communications in Heat and Mass Transfer**, vol. 38, pp. 363-367.

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

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

Killinger, D., Plutov, D.V., HITRAN-PC 4.0 – User manual, University of South Florida, 2009. http://www.cas.usf.edu/lidarlab/hitrان_pc.html, acessado em 29/01/2012.

Klason, T., Bai, X.S., Bahador, M., Nilsson, T.K., Sundén, B., 2008. “Investigation of radiative heat transfer in fixed bed biomass furnaces”, **Fuel**, vol. 87, pp. 2141-2153.

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

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

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

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

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

Krishnamoorthy, G., 2010b. "A comparison of gray and non-gray modeling approaches to radiative pool fire simulations", **Journal of Hazardous Materials**, vol. 182, pp. 570-580.

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

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

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

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

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

Leung, K.M., Lindstedt, R.P., Jones, W.P., 1991. "A simplified reaction mechanism for soot formation in nonpremixed flames", **Combustion and Flame**, vol. 87, pp. 289-305.

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

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

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

Lignell, D.O., Chen, J.H., Smith, P.J., 2008. “Three-dimensional direct numerical simulation of soot formation and transport in a temporally evolving nonpremixed ethylene jet flame”, **Combustion and Flame**, vol. 155, pp. 316-333.

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

Liu, F., Guo, H., Smallwood, G.J., 2004. “Effects of radiation model on the modeling of a laminar coflow methane/air diffusion flame”, **Combustion and Flame**, vol. 138, pp. 136-154.

Lockwood, F.C., Shah, N.G., 1981. “A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures”, em **18th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute**, pp. 1405-1409.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Mueller, M.E., Pitsch, H., 2012. “LES model for sooting turbulent nonpremixed flames”, **Combustion and Flame**, vol. 159, pp. 2166-2180.

Narayanan, P., Trouvé, A., 2009. “Radiation-driven flame weakening effects in sooting turbulent diffusion flames”, **Proceedings of the Combustion Institute**, vol. 32, pp. 1481-1489.

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

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

Okuyama, M., Echigo, R., Hanamura, K., Yoshida, H., Koda, M., Koganezawa, T., 2004. “Modeling of soot particles growth in fuel-rich premixed flame”, **International Journal of**

Heat and Mass Transfer, vol. 47, pp. 4625-4635.

Parente, A., Galletti, C., Tognotti, L., 2008. "Effect of the combustion model and kinetic mechanism on the MILD combustion in an industrial burner fed with hydrogen enriched fuels", **International Journal of Hydrogen Energy**, vol. 33, pp. 7553-7564.

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

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

Paul, S.C., Paul, M.C., 2010. "Radiative heat transfer during turbulent combustion process", **International Communications in Heat and Mass Transfer**, vol. 37, pp. 1-6.

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

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

Perlmutter, M., Howell, J.R., 1964. "Radiant transfer through a gray gas between concentric cylinders using Monte Carlo", **ASME Journal of Heat Transfer**, vol. 86, n. 2, pp. 169-179.

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

Poitou, D., Amaya, J., El Hafi, M., Cuénot, B., 2012. "Analysis of the interaction between turbulent combustion and thermal radiation using unsteady coupled LES/DOM

simulations”, **Combustion and Flame**, vol. 159, pp. 1605 - 1618.

Poitou, D., El Hafi, M., Cuenot, B., 2011. “Analysis of radiation modeling for turbulent combustion: development of a methodology to couple turbulent combustion and radiative heat transfer in LES”, **ASME Journal of Heat Transfer**, vol. 133, 062701.

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

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

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

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

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

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

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

Roger, M., Coelho, P.J., Da Silva, C.B., 2010. “The influence of the non-resolved scales of thermal radiation in large eddy simulation of turbulent flows: A fundamental study”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 53, pp. 2897-2907.

Roger, M., Coelho, P.J., Da Silva, C.B., 2011. “Relevance of subgrid-scales for large eddy simulations of turbulence-radiation interactions in a turbulent plane jet”, **Journal of**

Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, vol. 112, pp. 1250-1256.

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

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

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

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

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

Saqr, K.M., Aly, H.S., Sies, M.M., Wahid, M.A., 2010. "Effect of free stream turbulence on NO_x and soot formation in turbulent diffusion CH₄-air flames", **International Communications in Heat and Mass Transfer**, vol. 37, pp. 611-617.

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

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

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

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

Silva, C.V., Indrusiak, M.L.S., Berkow, A.B., 2010. “CFD analysis of the pulverized coal combustion processes in a 160 MWe tangentially-fired-boiler of a thermal power plant”, **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, vol. 32, n. 4, pp. 427 – 436.

Silva, C.V., Segatto, C.A., Paula, A.V., Centeno, F.R., França, F.H.R., 2013. “3D analysis of turbulent non-premixed combustion of natural gas in a horizontal cylindrical chamber”, **Anais do 22th Brazilian Congress of Mechanical Engineering**, Ribeirão Preto, SP, Brazil.

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

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

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

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

Solovjov, V. P., Webb, B. W., 2002. “A local-spectrum correlated model for radiative transfer in non-uniform gas media”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 73, pp. 361-373.

Solovjov, V. P., Webb, B. W., 2005, “The Cumulative Wavenumber Method for

Modeling Radiative Transfer in Gas Mixtures with Soot”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 93, pp. 273-287

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

Song, T.H., Viskanta, R., 1987. “Interaction of radiation with turbulence: application to a combustion system”, **Journal of Thermophysics**, vol. 1, n. 1, pp. 56 - 62.

Soufiani, A., 1991. “Temperature Turbulence Spectrum for High-Temperature Radiating Gases”, **Journal of Thermophysics**, vol. 5, pp. 489 - 494.

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

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

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

Stefanidis, G.D., Merci, B., Heynderickx, G.J., Marin, G.B., 2006. “CFD simulations of steam cracking furnaces using detailed combustion mechanisms”, **Computers and Chemical Engineering**, vol. 30, pp. 635-649.

Stewart, CD., Syed, K.J., Moss, J. B., 1991. “Modeling soot formation in non-premixed kerosene-air Flames”, **Combustion Science and Technology**, vol. 75, pp. 211-226.

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

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

Tessé, L., Dupoirieux, F., Taine, J., 2004. "Monte Carlo modeling Kinetics of radiative transfer in a turbulent sooty flame", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 47, pp. 555-572.

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

Xia, J.L., Yadigaroglu, G., Liu, Y.S., Scmidli, J., Smith, B.L., 1998. "Numerical and experimental study of swirling flow in a model combustor", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 41, pp. 1485-1497.

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

Yagi, S., Iino, H., 1961. "Radiation from soot particles in luminous flames", **Anais do 18th International Symposium on Combustion**, Pasadena, CA, pp. 288-293.

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

Yao, W., Zhang, J., Nadjai, A., Beji, T., Delichatsios, M.A., 2011. "A global soot model developed for fires: validation in laminar flames and application in turbulent pool fires", **Fire Safety Journal**, 2011, vol. 46, pp. 371-387.

Yoo, C.S., Im, H.G., 2007. "Transient soot dynamics in turbulent nonpremixed ethylene-air counterflow flames", **Proceedings of the Combustion Institute**, vol. 31, pp. 701-708.

Yoo, C.S., Im, H., Wang, Y., Trouve, A., 2005. "Interaction of turbulence, chemistry, and radiation in strained nonpremixed flames", **Journal of Physics Conference Series**, vol. 16, pp. 91-100.

Vascellari, M., G. Cau, G., 2012. "Influence of turbulence-chemical interaction on CFD pulverized coal MILD", **Fuel**, vol. 101, pp. 90-101.

Venuturumilli, R., Chen, L., 2009. "Comparison of four-step reduced mechanism and starting mechanism for methane diffusion flames", **Fuel**, vol. 88, pp. 1435 – 1443.

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

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

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

Wang, L., Dong, Y., Lu, X., 2005. "An investigation of turbulent open channel flow with heat transfer by large eddy simulation", **Computers & Fluids**, vol. 34, pp. 23-47.

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

Woolley, R.M., Fairweather, M., Yunardi, Y., 2009. "Conditional moment closure modeling of soot formation in turbulent, non-premixed methane and propane flames", **Fuel**, vol. 88, pp. 393-407.

Wu, Y.Y., Chan, C.K., Zhou, L.X., 2011. "Large-eddy simulation of an ethylene-air turbulent premixed V-flame", **Journal of Computational and Applied Mathematics**, doi:10.1016/j.cam.2011.01.023.

Wu, Y., Haworth, D.C., Modest, M.F., Cuenot, B., 2005. "Direct numerical simulation of turbulence/radiation interaction in premixed combustion systems", **Proceedings of the Combustion Institute**, vol. 30, pp. 639-646.

Zhang, J., Gicquel, O., Veynante, D., Taine, J., 2009. "Monte Carlo Method of radiative heat transfer applied to a turbulent flame modeling with LES", **Comptes Rendus Mécanique**, vol. 337, pp. 539-549.

Zhao, Y., Jianbo, L., Lu, L., 2011. "Numerical modeling of fires on gas pipelines", **Applied Thermal Engineering**, vol. 31, pp. 1347-1351.