

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

ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DAS PROPRIEDADES RADIATIVAS DE UM MEIO
PARTICIPANTE NA INTERAÇÃO TURBULÊNCIA-RADIAÇÃO EM UM ESCOAMENTO
INTERNO NÃO REATIVO

por

Guilherme Crivelli Fraga

Dissertação para a obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Março de 2016

ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DAS PROPRIEDADES RADIATIVAS DE UM MEIO
PARTICIPANTE NA INTERAÇÃO TURBULÊNCIA-RADIAÇÃO EM UM ESCOAMENTO
INTERNO NÃO REATIVO

por

Guilherme Crivelli Fraga
Engenheiro Mecânico

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

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Coorientadora: Prof^a. Dr^a. Adriane Prisco Petry

Aprovada por:

Prof. Dr. Felipe Roman Centeno (UFRGS)

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira (PROMEC/UFRGS)

Prof. Dr. Horácio Antônio Vielmo (PROMEC/UFRGS)

Prof. Dr. Luiz Alberto O. Rocha
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 10 de Março de 2016

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à minha família, pelo apoio e compreensão. Aos meus pais, aos meus irmãos e, em especial, à minha avó, que me acolheu em sua casa no período que escrevi a maior parte deste texto.

Agradeço também à minha colega e namorada Roberta. Sou muito grato a ajuda dela, que veio de muitas formas: como palavras de incentivo quando eu estava enfrentando dificuldades ao longo do mestrado, como contribuições para diversas partes do trabalho, como longas e inúmeras revisões do texto, como ajuda na preparação da defesa e como, mais do que tudo, muita tolerância e muito carinho.

Agradeço aos meus colegas e amigos, tanto os que permaneceram comigo desde a graduação como os que conheci durante o mestrado. Agradeço principalmente aos meus colegas do Laboratório de Radiação Térmica (LRT), que acompanharam toda a trajetória da minha pesquisa e que contribuíram muito para ela de várias formas.

Agradeço muito ao meu orientador, Prof. Francis H.R. França, e à minha coorientadora, Prof.^a Adriane P. Petry. A importância desses dois professores foi enorme, não apenas para a elaboração desta dissertação, mas também para meu desenvolvimento profissional e acadêmico. Sempre serei grato por seus conselhos e por nossas longas discussões.

Agradeço ainda aos membros da banca, por sua disponibilidade em avaliar e contribuir com esse trabalho.

Por fim, agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pela bolsa de estudos concedida.

RESUMO

A interação turbulência-radiação (TRI, do inglês *Turbulence-Radiation Interaction*) resulta do acoplamento altamente não linear entre flutuações da intensidade de radiação e flutuações da temperatura e da composição química do meio, e tem-se demonstrado experimentalmente, teoricamente e numericamente que este é um fenômeno relevante em diversas aplicações envolvendo altas temperaturas, especialmente em problemas reativos. Neste trabalho, o TRI é analisado em um escoamento interno não reativo de um gás participante que se desenvolve em um duto de seção transversal quadrada, para diferentes intensidades de turbulência do escoamento e considerando duas espécies distintas para a composição do fluido de trabalho (dióxido de carbono e vapor de água). O objetivo central é avaliar como a inclusão ou não da variação espectral das propriedades radiativas do meio no cálculo influencia a magnitude do TRI. Isso é feito através de simulações numéricas no código de dinâmica dos fluidos computacional *Fire Dynamics Simulator* (FDS), que resolve, através do método dos volumes finitos, as equações fundamentais que regem o problema – isto é, os balanços de massa, de quantidade de movimento e de energia e a equação de estado – em uma formulação adequada para baixos números de Mach, utilizando um algoritmo de solução explícito e de segunda ordem no tempo e no espaço. A turbulência é modelada através da simulação de grandes escalas (LES, do inglês *Large Eddy Simulation*), empregando-se o modelo de Smagorinsky dinâmico para o fechamento dos termos submalha; para a radiação térmica, o método dos volumes finitos é utilizado na discretização da equação da transferência radiativa e os modelos do gás cinza e da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG, do inglês *Weighted-Sum-of-Gray-Gases*) são implementados como forma de desconsiderar e de incluir a dependência espectral das propriedades radiativas, respectivamente. A magnitude do TRI sobre o problema é avaliada através de diferenças entre as médias temporais dos fluxos de calor superficiais e do termo fonte radiativo obtidas em cálculos que consideram os efeitos do fenômeno e cálculos que os negligenciam. Em geral, a interação turbulência-radiação mostrou ser pouco importante em todos os casos considerados, o que concorda com resultados de outros estudos sobre o tema em escoamento não reativos. Com o modelo WSGG, as contribuições do fenômeno foram maiores do que com a hipótese do gás cinza, evidenciando que a inclusão da variação espectral na solução do problema radiativo tem um impacto sobre a magnitude dos efeitos do TRI. Além disso, é feita uma discussão, em parte inédita no contexto do TRI, sobre diferentes metodologias para a análise do fenômeno. Finalmente, é proposto um fator de correção para o termo fonte radiativo médio no modelo WSGG, que é validado através de sua implementação nos casos simulados. Em estudos futuros, uma análise de sensibilidade sobre os termos constituintes desse fator de correção pode levar a um melhor entendimento de como as flutuações de temperatura se correlacionam com o fenômeno da interação turbulência-radiação.

Palavras Chave: Interação turbulência-radiação; escoamento não reativo; modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza; simulação de grandes escalas; *Fire Dynamics Simulator*.

ABSTRACT

Turbulence-radiation interaction (TRI) results from the highly non-linear coupling between fluctuations of radiation intensity and fluctuations of temperature and chemical composition of the medium, and its relevance in a number of high-temperature problems, especially when chemical reactions are included, has been demonstrated experimentally, theoretically, and numerically. In the present study, the TRI is analyzed in a channel flow of a non-reactive participating gas for different turbulence intensities of the flow at the inlet and considering two distinct species for the medium composition (carbon dioxide and water vapor). The central objective is to evaluate how the inclusion or not of the spectral variation of the radiative properties of a participating gas in the radiative transfer calculations affects the turbulence-radiation interaction. With this purpose, numerical simulations are performed using the computational fluid dynamics Fortran-based code *Fire Dynamics Simulator*, that employs the finite volume method to solve a form of the fundamental equations – i.e., the mass, momentum and energy balances and the state equation – appropriate for low Mach number flows, through an explicit second-order (both in time and in space) core algorithm. Turbulence is modeled by the large eddy simulation approach (LES), using the dynamic Smagorinsky model to close the subgrid-scale terms; for the thermal radiation part of the problem, the finite volume method is used for the discretization of the radiative transfer equation and the gray gas and weighted-sum-of-gray-gases (WSGG) models are implemented as a way to omit and consider the spectral dependence of the radiative properties, respectively. The TRI magnitude in the problem is evaluated by differences between values for the time-averaged heat fluxes at the wall (convective and radiative) and for the time-averaged radiative heat source calculated accounting for and neglecting the turbulence-radiation interaction effects. In general, TRI had little importance over all the considered cases, a conclusion that agrees with results of previous studies. When using the WSGG model, the contributions of the phenomenon were greater than with the gray gas hypothesis, demonstrating that the inclusion of the spectral variance in the solution of the radiative problem has an impact in the TRI effects. Furthermore, this paper presents a discussion, partly unprecedented in the context of the turbulence-radiation interaction, about the different methodologies that can be used for the TRI analysis. Finally, a correction factor is proposed for the time-averaged radiative heat source in the WSGG model, which is then validated by its implementation in the simulated cases. In future studies, a sensibility analysis on the terms that compose this factor can lead to a better understanding of how fluctuations of temperature correlate with the turbulence-radiation interaction phenomenon.

Keywords: Turbulence-radiation interaction; non-reactive flow; weighted-sum-of-gray-gases model; large eddy simulation; *Fire Dynamics Simulator*.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Revisão bibliográfica	3
1.2	Objetivos e contribuição do trabalho	9
1.3	Organização do texto	12
2	FUNDAMENTAÇÃO FÍSICA E MATEMÁTICA	14
2.1	Equações fundamentais	14
2.2	Modelagem da turbulência	16
2.2.1	Simulação numérica direta (DNS)	16
2.2.2	Modelagem com médias de Reynolds (RANS)	17
2.2.3	Simulação de grandes escalas (LES)	18
2.3	O formalismo LES	19
2.3.1	Filtragem espacial	20
2.3.2	Equações fundamentais filtradas	21
2.3.3	Modelo de Smagorinsky dinâmico	22
2.3.4	Método dos vórtices sintéticos (SEM)	23
2.3.5	Medida de resolução da turbulência (MTR)	25
2.4	A radiação térmica em meios participantes	26
2.4.1	A intensidade de radiação	27
2.4.2	O corpo negro	28
2.4.3	A equação da transferência radiativa (RTE)	29
2.4.4	O termo fonte radiativo e o fluxo de calor radiativo nas paredes	30
2.5	Modelos espectrais	31
2.5.1	O modelo do gás cinza (GG)	32
2.5.2	O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG)	34
2.6	A interação turbulência-radiação (TRI)	39
2.6.1	A média temporal da RTE	39
2.6.2	Fluxo de calor e termo fonte radiativo médios	41
3	MODELAGEM NUMÉRICA	43
3.1	Sobre o Fire Dynamics Simulator (FDS)	43
3.2	A aproximação de baixos números de Mach e a equação de estado	44
3.3	Transporte de massa	45
3.3.1	Funções de interpolação	46
3.4	A equação da energia e o divergente de velocidade	48
3.4.1	Cálculo da temperatura	48
3.4.2	Determinação da entalpia sensível	49
3.5	Simplificação do balanço de quantidade de movimento	49
3.5.1	Condições de contorno de velocidade e a lei da parede	50
3.6	A equação para a pressão (equação de Poisson)	51
3.6.1	Condições de contorno de pressão	52
3.7	A equação da transferência radiativa	53
3.7.1	Discretização angular	53

3.7.2	Discretização espacial.....	54
3.7.3	Condições de contorno para a radiação térmica.....	57
3.8	Restrições de passo de tempo e estabilidade numérica.....	57
3.8.1	O critério de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL)	58
3.8.2	Restrição de massa específica	58
3.8.3	Restrição de volume de fluido.....	59
3.8.4	Critério geral para o passo de tempo	59
4	METODOLOGIA.....	60
4.1	Descrição do problema	60
4.1.1	Configuração geométrica.....	60
4.1.2	Condição inicial e condições de contorno.....	61
4.1.3	Parâmetros de entrada para o método dos vórtices sintéticos.....	62
4.1.4	Metodologia para a determinação da temperatura do reservatório de saída	65
4.2	Discretização numérica	68
4.3	Análise da qualidade da discretização	68
4.3.1	Discretização espacial.....	69
4.3.2	Discretização temporal.....	74
4.3.3	Discretização angular.....	77
4.3.4	Critério de Courant-Friedrichs-Lewy e medida da resolução de turbulência.....	79
4.4	Metodologia para a análise do TRI	80
4.4.1	Forma de obtenção dos resultados “com TRI” e “sem TRI”	81
4.4.2	Definição das diferenças percentuais entre soluções	82
4.5	Casos simulados	82
5	RESULTADOS	85
5.1	Análise dos efeitos do TRI	85
5.1.1	Influência da dependência espectral das propriedades radiativas do meio.....	85
5.1.2	Influência da intensidade de turbulência do escoamento na entrada	93
5.1.3	Influência das diferentes espécies químicas de gás	94
5.2	Discussão sobre a forma de obter a solução “sem TRI”	97
5.2.1	Os fluxos de calor	98
5.2.2	O termo fonte radiativo	99
5.2.3	O caráter aproximado das abordagens “sem TRI”	101
5.3	Discussão sobre diferenças percentuais no TRI.....	102
5.4	A correção para o termo fonte no modelo WSGG	109
6	CONCLUSÕES.....	113
6.1	Sugestões de trabalhos futuros	115
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	117
	APÊNDICE A.....	130
A.1	Limite inferior para o cálculo das médias temporais	130
A.2	Limite superior para o cálculo das médias temporais.....	132
	APÊNDICE B	134

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Coefficiente de absorção de uma mistura de ar (gás inerte) e 20 % em volume de vapor de água a temperatura de 400 K e pressão total de 1 atm na faixa espectral $1500 \text{ cm}^{-1} < \eta < 1700 \text{ cm}^{-1}$ (adaptado de Silva, 2015). ...	31
Figura 2.2	Representação do coeficiente de absorção no modelo WSGG com $N_{G,\chi}$ gases cinza [adaptado de Dorigon et al., 2013].	35
Figura 3.1	Representação da esfera unitária e do ângulo de controle utilizados para a discretização angular da RTE.	53
Figura 4.1	Geometria do duto modelado e condições de contorno impostas nas simulações numéricas realizadas nesta dissertação.	60
Figura 4.2	Resultados obtidos por Jarrin, 2008, para $N_e = 1000$: sinal da componente de velocidade v com o tempo (a); função de densidade de probabilidade de v (b) e contornos da componente de velocidade w na seção transversal (c) [adaptado de Jarrin, 2008].	64
Figura 4.3	Resultados para L_e na seção transversal dos volumes imediatamente posteriores à fronteira de entrada, para o CO_2 . Da esquerda para direita: IT igual a 0 %, 10 % e 20 %; de cima para baixo: modelo GG com κ constante, modelo GG com $\kappa(T)$ e modelo WSGG.	66
Figura 4.4	Esquema da metodologia iterativa para a determinação da temperatura do reservatório de saída.	68
Figura 4.5	Pontos utilizados na análise da qualidade da discretização numérica, mostrados na seção longitudinal média do duto, correspondente ao plano $z = 0,25 \text{ m}$.	69
Figura 4.6	Resultados para a temperatura média, (a) e (b), e para o termo fonte radiativo médio, (c) e (d), obtidos na análise da qualidade da discretização espacial.	71
Figura 4.7	Resultados para a temperatura média, (a) e (b), e para o termo fonte radiativo médio, (c) e (d), obtidos na análise da qualidade da discretização temporal.	75
Figura 4.8	Resultados para a temperatura média, (a) e (b), e para o termo fonte radiativo médio, (c) e (d), obtidos na análise da qualidade da discretização angular.	78
Figura 4.9	Média temporal do critério MTR no plano longitudinal médio do duto, com $IT = 0 \%$. CO_2 (a, c, e) e H_2O (b, d) como gases participantes; modelo espectral WSGG (a), modelo GG com κ função da temperatura local (b, c) e modelo GG com κ constante (d, e).	80
Figura 5.1	Campo médio de temperatura no plano longitudinal central do duto, para $IT = 10 \%$: H_2O , modelo WSGG (a); CO_2 , WSGG (b); H_2O , modelo $\text{GG}_{\kappa(T)}$ (c); CO_2 , $\text{GG}_{\kappa(T)}$ (d); H_2O , modelo GG_{κ} (e); CO_2 , GG_{κ} (f).	86
Figura 5.2	Campo médio do termo fonte radiativo no plano longitudinal central do duto, para $IT = 10 \%$: H_2O , modelo WSGG (a); CO_2 , WSGG (b); H_2O , modelo $\text{GG}_{\kappa(T)}$ (c); CO_2 , $\text{GG}_{\kappa(T)}$ (d); H_2O , modelo GG_{κ} (e); CO_2 , GG_{κ} (f).	87

Figura 5.3	Diferenças relativas entre as soluções “com TRI” e sem “TRI” para as médias dos fluxos de calor radiativo e convectivo na parede, com $IT = 10\%$. Da esquerda para a direita: resultados para o H_2O e para o CO_2 ; de cima para baixo: $\langle q''_{r,w} \rangle$ e $\langle q''_{c,w} \rangle$	88
Figura 5.4	Comportamento do coeficiente de absorção em função da temperatura para o CO_2 e o H_2O no modelo $GG_{\kappa(T)}$, usando as correlações de Cassol et al., 2015, e comportamento da intensidade de corpo negro, também em função da temperatura.	90
Figura 5.5	Diferenças normativas de $\langle S_r \rangle$ entre as soluções “com TRI” e sem “TRI” para o CO_2 e com $IT = 10\%$, para os modelos WSGG (a, d, g), $GG_{\kappa(T)}$ (b, e, h) e GG_{κ} (c, f, i); e nos planos longitudinais $z = 0,25$ m (a, b, c), $z = 0,125$ m (d, e, f) e $z = 0,0625$ m (g, h, i).	91
Figura 5.6	Campo instantâneo de velocidade no plano longitudinal médio do duto em $t = 15$ s, para o CO_2 e com o modelo WSGG, para diferentes valores de IT : 0% (a), 5% (b), 10% (c), 15% (d), e 20% (e).	93
Figura 5.7	Campo instantâneo de temperatura no plano longitudinal médio do duto em $t = 15$ s, para o CO_2 e com o modelo WSGG, para diferentes valores de IT : 0% (a), 5% (b), 10% (c), 15% (d), e 20% (e).	94
Figura 5.8	Diferenças relativas entre as soluções “com TRI” e sem “TRI” para o fluxo de calor radiativo médio na parede. Da esquerda para a direita: resultados com os modelos WSGG, $GG_{\kappa(T)}$ e GG_{κ} ; de cima para baixo: resultados para o H_2O e CO_2	95
Figura 5.9	Campo médio de temperatura no plano longitudinal médio do duto para o vapor de água (a) e para o dióxido de carbono (b).	96
Figura 5.10	Campo médio do termo fonte radiativo no plano longitudinal médio do duto para o vapor de água (a) e para o dióxido de carbono (b).	96
Figura 5.11	Diferenças relativas entre as soluções “com TRI” e sem “TRI” para o fluxo de calor radiativo médio na parede, com $IT = 10\%$, para os modelos WSGG (a), $GG_{\kappa(T)}$ (b) e GG_{κ} (c).	97
Figura 5.12	Diferenças normativas de $\langle S_r \rangle$ em relação ao resultado “com TRI” obtidas com a solução “sem TRI simples”, (a), (c) e (e); e com a solução “sem TRI alternativa” (b), (d) e (f). Planos longitudinais $z = 0,25$ m, (a) e (b); $z = 0,125$ m, (c) e (d); $z = 0,0625$ m, (e) e (f).	100
Figura 5.13	Fluxo de calor médio na solução negligenciando o TRI, com $IT = 10\%$. De cima para baixo, H_2O e CO_2 ; da esquerda para a direita: fluxo radiativo e fluxo convectivo.	103
Figura 5.14	Termo fonte radiativo médio na solução negligenciando o TRI, com $IT = 10\%$. De cima para baixo: H_2O e CO_2 ; da esquerda para a direita, linhas $(y, z) = (0,25$ m, $0,25$ m), $(0,125$ m, $0,25$ m) e $(0,0625$ m, $0,25$ m).	104
Figura 5.15	Diferenças percentuais relativas e normativas para $\langle S_r \rangle$, com $IT = 10\%$. De cima para baixo: H_2O e CO_2 ; da esquerda para a direita, linhas $(y, z) = (0,25$ m, $0,25$ m), $(0,125$ m, $0,25$ m) e $(0,0625$ m, $0,25$ m).	106
Figura 5.16	Diferenças percentuais absolutas para $\langle S_r \rangle$, com $IT = 10\%$. De cima para baixo: H_2O e CO_2 ; da esquerda para a direita, linhas $(y, z) = (0,25$ m, $0,25$ m), $(0,125$ m, $0,25$ m) e $(0,0625$ m, $0,25$ m).	107
Figura 5.17	Diferença relativa do termo fonte radiativo médio nas vizinhanças do ponto de máximo local de $\psi_{rel, \langle S_r \rangle}$ para o caso com o modelo WSGG, CO_2 e $IT = 0\%$, nos planos xy (a) e xz (b).	108

Figura 5.18	Campo do fator de correção ϱ para o termo fonte radiativo médio no modelo WSGG com o CO_2 e $IT = 10\%$, em três planos longitudinais do duto: $z = 0,25$ m (a), $z = 0,125$ m (b), e $z = 0,0625$ m (c).....	111
Figura A.1	Resultados instantâneos de temperatura em alguns pontos no interior do domínio de cálculo para o H_2O (a) e para o CO_2 (b).....	131
Figura A.2	Diferença percentual entre médias temporais de temperatura calculadas entre dois intervalos consecutivos de 1 s de duração.	131
Figura A.3	Diferença percentual entre médias de temperatura calculadas em períodos de tempo distintos. Em todos os casos, médias tomadas a partir dos 5 s de simulação.....	132

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1	Coeficientes polinomiais para o cálculo do coeficiente de absorção no modelo do gás cinza de Cassol et al., 2015.	34
Tabela 2.2	Coeficientes do modelo WSGG com quatro gases cinza para o dióxido de carbono [Cassol et al., 2014].....	37
Tabela 2.3	Coeficientes do modelo WSGG com quatro gases cinza para o vapor de água [Cassol et al., 2014].	37
Tabela 4.1	Algumas propriedades físicas, avaliadas na temperatura em que o escoamento entra no domínio computacional, e parâmetros de entrada para os gases utilizados nesta dissertação.	63
Tabela 4.2	Parâmetros das malhas empregadas no processo iterativo para a determinação da temperatura do reservatório externo.	67
Tabela 4.3	Parâmetros das malhas empregadas na análise da qualidade da discretização espacial.....	70
Tabela 4.4	Diferenças percentuais dos resultados médios de temperatura e de termo fonte radiativo em relação à malha espacial imediatamente mais refinada. ...	72
Tabela 4.5	Diferenças percentuais dos resultados médios de temperatura e de termo fonte radiativo em relação à malha mais refinada (malha Q_x7).	72
Tabela 4.6	Taxas médias de transferência de calor para as paredes (por radiação e total) obtidas com os diferentes níveis de discretização espacial e diferenças percentuais dos resultados em relação à malha imediatamente mais refinada.	73
Tabela 4.7	Diferenças percentuais dos resultados médios de temperatura e de termo fonte radiativo em relação ao passo de tempo imediatamente mais refinado.	76
Tabela 4.8	Taxas médias de transferência de calor para as paredes (por radiação e total) obtidas com os diferentes níveis de discretização temporal e diferenças percentuais dos resultados em relação à malha imediatamente mais refinada.	76
Tabela 4.9	Diferenças percentuais dos resultados médios de temperatura e de termo fonte radiativo em relação à discretização angular imediatamente mais fina.	77
Tabela 4.10	Taxas médias de transferência de calor para as paredes (por radiação e total) obtidas com os diferentes níveis de discretização angular e diferenças percentuais dos resultados em relação à malha imediatamente mais refinada.	78
Tabela 5.1	Diferenças percentuais normativas para o termo fonte radiativo médio com o vapor de água e o dióxido de carbono.....	92
Tabela 5.2	Diferenças normativas para o termo fonte radiativo médio utilizando a solução “sem TRI simples”.....	101
Tabela 5.3	Diferenças percentuais relativas para o termo fonte radiativo médio com o vapor de água e o dióxido de carbono.	105
Tabela B.1	Denominação dos casos	136

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

CAPES	Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior
CFD	Dinâmica dos fluidos computacional (<i>Computational Fluid Dynamics</i>)
CFL	Critério de Courant-Friedrichs-Lewy
DNS	Simulação numérica direta (<i>Direct Numerical Simulation</i>)
DOM	Método das ordenadas discretas (<i>Discrete Ordinates Method</i>)
EWB	Modelo de banda larga exponencial (<i>Exponential Wide-Band</i>)
FDS	<i>Fire Dynamics Simulator</i>
FSCK	Modelo de distribuição k -correlacionado para espectro completo (<i>Full-Spectrum Correlated-k</i>)
FVM	Método dos volumes finitos (<i>Finite Volume Method</i>)
GG	Modelo do gás cinza (<i>Gray Gas</i>)
HITEMP	Banco de dados espectral para espécies a 1000K
HITRAN	Banco de dados espectral para espécies a 296K (<i>high-resolution transmission molecular absorption database</i>)
JANAF	<i>Joint Army-Naval-Air Force</i>
LBL	Método linha-por-linha (<i>Line-By-Line</i>)
LES	Simulação de grandes escalas (<i>Large-Eddy Simulation</i>)
MTR	Medida de resolução da turbulência (<i>Measure of Turbulence Resolution</i>)
NIST	<i>National Institute of Standards and Technology</i>
OTFA	Aproximação de flutuações opticamente finas (<i>Optically Thin Fluctuation Approximation</i>)
PDF	Função densidade de probabilidade (<i>Probability Density Function</i>)
RANS	Simulação com médias de Reynolds (<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>)
RMS	Raiz do valor quadrático médio (<i>Root Mean Square</i>)
RTE	Equação da transferência radiativa (<i>Radiative Transfer Equation</i>)
SEM	Método dos vórtices sintéticos (<i>Synthetic Eddy Method</i>)
SLW	Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza baseada em linhas espectrais (<i>Spectral Line-based WSGG</i>)
SNB	Modelo de banda estreito estatístico (<i>Statistical Narrow Band</i>)
SNBCK	Modelo k -correlacionado de banda estreita estatístico (<i>Statistical Narrow Band based Correlated-k</i>)
TRI	Interação turbulência-radiação (<i>Turbulence-Radiation Interaction</i>)
TVD	Esquema de valor total decrescente (<i>Total Variation Diminishing</i>)
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul

WSGG

Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (*Weighted-Sum-of-Gray-Gases*)

LISTA DE SÍMBOLOS

a	Coeficiente de temperatura no modelo WSGG
A	Área, m^2
B	Função limitadora
b_k	Coeficientes polinomiais da função do coeficiente de temperatura no modelo WSGG ($k = 1, 2, \dots, N_K$), $K^{(k-1)}$
C	Número de Courant
C_k	Coeficientes para o cálculo do fator de correção ϱ ($k = 1, 2, 3$ e 4), $K^{(k+3)}$
C_{mod}	Número de Courant modificado
C_v	Constante do modelo de Deardorff, 0,1
C_K	Constante de von Karman, 0,41
c_0	Velocidade da luz no vácuo, $2,998 \times 10^8$ m/s
c_p	Calor específico à pressão constante, J/(kg K)
$c_{GG,i}$	Constantes polinomiais do modelo de gás cinza de Cassol et al., 2015 ($i = 0, 1, \dots, 5$), $m^{-1} atm^{-1} K^{-i}$
D	Integração sobre determinado ângulo de controle do produto da direção de propagação da intensidade pelo vetor normal à superfície
Dim	Dimensão do problema
D_h	Diâmetro hidráulico, m
e	Energia interna específica, J/kg
F_i	Componente do vetor \mathbf{F} na direção i , m/s^2
\mathbf{F}	Vetor do fluxo de quantidade de movimento, m/s^2
f_ϱ	Função de correção genérica para o TRI
G	Função filtro, na simulação de grandes escalas, m^{-3}
g	Índice do gás cinza no modelo WSGG
H	Termo de gradiente de pressão, m^2/s^2
h_P	Constante de Planck, $6,626 \times 10^{-34}$ J s
h_s	Entalpia específica sensível, J/kg
i, j, k	Índices do volume finito nas direções x , y e z
$\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$	Vetores unitários nas direções dos eixos principais
I	Intensidade de radiação, $W/(m^2 sr)$
I_b	Intensidade de radiação do corpo negro, $W/(m^2 sr)$
IT	Intensidade de turbulência, %
k	Energia cinética turbulenta por unidade de massa, m^2/s^2

k^{res}	Parcela resolvida da energia cinética do escoamento por unidade de massa, m^2/s^2
k^{sgs}	Parcela na escala submalha da energia cinética do escoamento por unidade de massa, m^2/s^2
k_B	Constante de Boltzmann, $1,3807 \times 10^{-23}$ J/K
l	Ângulo de controle
L	Comprimento característico associado ao escoamento, m
L_e	Escala de comprimento dos vórtices, m
M	Critério de Pope, 2004
\mathcal{M}	Massa molar do gás, kg/kmol
\mathbf{n}	Vetor unitário normal à superfície
n	Índice do passo de tempo
n_r	Índice de refração
N_e	Número de vórtices no método dos vórtices sintéticos
N_G	Número de gases cinza no modelo WSGG
N_m	Número de volumes finitos da discretização m
N_K	Grau do polinômio que caracteriza o coeficiente de temperatura no modelo WSGG
N_θ	Número de bandas em que a esfera unitária é dividida na direção polar
N_φ	Número de bandas em que a esfera unitária é dividida na direção azimutal
N_Ω	Número total de ângulos de controle
P	Pressão ou pressão parcial, Pa
p	Pressão ou pressão parcial, Pa
\hat{p}	Perturbação de pressão introduzida pelo escoamento, Pa
p^\star	Termo de pressão modificada, Pa
\wp	Pressão de fundo para determinada zona de pressão, Pa
q_c	Taxa de transferência de calor por convecção, W
q_r	Taxa de transferência de calor por radiação, W
q_t	Taxa líquida de transferência de calor (por radiação e por convecção), W
\mathbf{q}_r''	Vetor fluxo de calor radiativo, W/m^2
q'''	Taxa volumétrica de geração interna de energia, W/m^3
R	Constante universal dos gases, (8,3145 kJ/(kmol K))
r_m	Razão de refinamento entre as malhas m e $m + 1$
r_ϕ	Razão entre a variação local e a variação à montante do escalar ϕ
Re	Número de Reynolds
\mathbf{s}	Vetor direção
s	Caminho, posição espacial

S_r	Termo fonte radiativo, W/m^3
T	Temperatura, K ou $^{\circ}C$
T_0	Temperatura de referência para o cálculo da entalpia sensível, 298,15 K
T_{med}	Temperatura média de mistura, K ou $^{\circ}C$
t	Tempo, s
U	Radiação incidente, W/m^2
\mathbf{u}	Vetor velocidade, m/s
u, v, w	Componentes ortogonais de velocidade, m/s
u_i	Componente da velocidade na direção i : $u_1 = u, u_2 = v, u_3 = w$, m/s
u_{med}	Velocidade média de mistura, m/s
u_{τ}	Velocidade de fricção, m/s
u^+	Velocidade adimensional
V	Volume, m^3
\mathbf{x}	Vetor posição, m
x, y, z	Coordenadas cartesianas, m
X_i	Componente da força de corpo atuando na direção i , N/m^3
x_i	Coordenada espacial na direção i : $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$, m
y^+	Distância adimensional da parede
Y	Concentração química

Letras gregas

α	Coeficiente central da equação da transferência radiativa discretizada, m^2
$\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$	Coeficientes nos pontos vizinhos da equação da transferência radiativa discretizada, m^2
β	Termo independente na equação da transferência radiativa discretizada, W
Δ	Tamanho característico do filtro, na simulação de grandes escalas, m
$\Delta\eta$	Porção do espectro de número de onda, cm^{-1}
δt	Passo de tempo, s
$\delta x, \delta y, \delta z$	Dimensões do volume finito nas direções dos eixos coordenados x, y e z , respectivamente, m
δ_{ij}	Delta de Kronecker
$\delta\phi_{loc}$	Variação local do escalar ϕ
$\delta\phi_{up}$	Variação do escalar ϕ à montante
$\delta\Omega$	Tamanho do ângulo de controle
ϵ	Taxa de dissipação viscosa, m^2/s^3
ϵ_{ijk}	Símbolo de Levi-Civita

ε	Emissividade (para superfícies) ou emitância (para meios participantes)
ζ	Critério de convergência
η	Número de onda, cm^{-1}
θ	Ângulo polar
θ^+	Limite superior da banda θ
θ^-	Limite inferior da banda θ
κ	Coefficiente de absorção, m^{-1}
κ_p	Coefficiente de absorção baseado na pressão, $\text{atm}^{-1}\text{m}^{-1}$
λ	Condutividade térmica, $\text{W}/(\text{m K})$
μ	Viscosidade dinâmica, Pa s
μ_T	Viscosidade (dinâmica) turbulenta, Pa s
ξ	Escalar de integração, K
ξ	Vetor de integração, m
ρ	Massa específica, kg/m^3
ϱ	Fator de correção para o termo fonte radiativo médio no modelo WSGG, W/m^3
σ	Constante de Stefan-Boltzmann, $5,6704 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K}^4)$
σ_s	Coefficiente de espalhamento, m^{-1}
τ	Tensão viscosa, Pa
τ_{ij}^{sgs}	Tensão na escala submalha, Pa
Φ	Dissipação viscosa, s^{-2}
ϕ	Escalar ou variável genérico
φ	Ângulo azimutal
χ	Espécie química genérica
ψ	Diferença
ψ_{abs}	Diferença absoluta
ψ_{norm}	Diferença percentual normativa, %
ψ_{rel}	Diferença percentual relativa, %
Ψ	Função de fase do espalhamento
ω_i	Componente na direção i do vetor vorticidade
Ω	Ângulo sólido correspondente ao vetor direção \mathbf{s}

Subscritos

$(.)_d$	Grandeza a jusante
$(.)_f$	Grandeza avaliada na face f

$(\cdot)_g$	Grandeza correspondente ao gás cinza g no modelo WSGG
$(\cdot)_{ijk}$	Grandeza avaliada na célula ijk
$(\cdot)_{in}$	Incidente
$(\cdot)_m$	Grandeza correspondente à mistura de espécies químicas que compõem o meio participante
$(\cdot)_m$	Grandeza correspondente ao nível de discretização m
$(\cdot)_{max}$	Valor máximo
$(\cdot)_{min}$	Valor mínimo
$(\cdot)_{nTRI}$	Grandeza obtida negligenciando os efeitos da interação turbulência-radiação
$(\cdot)_{ref}$	Valor de referência
$(\cdot)_{RMS}$	Raiz quadrada do valor médio quadrático da grandeza
$(\cdot)_{TRI}$	Grandeza obtida considerando os efeitos da interação turbulência-radiação
$(\cdot)_u$	Grandeza a montante
$(\cdot)_w$	Grandeza avaliada na superfície do domínio de cálculo
$(\cdot)_\eta$	Dependência espectral
$(\cdot)_\chi$	Grandeza correspondente à espécie química χ
$(\cdot)_\infty$	Grandeza no exterior ou na fronteira do domínio de cálculo

Sobrescritos

$\langle(\cdot)\rangle$	Média temporal
$(\cdot)^l$	Grandeza avaliada no ângulo de controle l
$(\cdot)'$	Flutuação em relação à média temporal
$(\cdot)''$	Grandeza por unidade de área
$(\cdot)^*$	Estimativa de primeira ordem da grandeza no passo de tempo seguinte
$(\cdot)^{**}$	Valor corrigido da grandeza no passo de tempo seguinte
$(\cdot)^+$	Limite superior da banda angular
$(\cdot)^-$	Limite inferior da banda angular
$\bar{(\cdot)}$	Média aritmética da grandeza avaliada em todas as faces do volume computacional
$\overline{(\cdot)}$	Grandeza espacialmente filtrada
$\overline{(\cdot)}^{LF}$	Grandeza obtida de uma limitador de fluxo
$\widetilde{(\cdot)}$	Grandeza filtrada pelo filtro Favre

1 INTRODUÇÃO

A turbulência é o estado mais comum no escoamento de fluidos em uma grande variedade de situações, tanto em aplicações tecnológicas como em condições naturais [Libby, 1996]. A preponderância desse fenômeno deve-se ao fato de que pequenas perturbações em escoamentos são amplificadas de forma natural, gerando instabilidades que levam à transição do regime laminar para o turbulento. Superpostas ao escoamento principal, o regime turbulento apresenta flutuações de velocidade e pressão que são funções do tempo e da posição, causadas pela passagem de vórtices de várias escalas – desde as maiores, controladas pela geometria do problema, até as menores, controladas pela viscosidade do fluido [Freire et al., 2002; Möller e Silvestrini, 2004]. Embora uma definição exata da turbulência seja difícil de ser dada, Tennekes e Lumley, 1994, citam como algumas características desse regime a difusividade, os altos números de Reynolds, as flutuações tridimensionais da vorticidade e a dissipação.

Embora as equações de Navier-Stokes descrevam tanto escoamentos laminares como escoamentos turbulentos de fluidos Newtonianos, uma série de limitações impede a solução algébrica dessas equações para quase todos problemas turbulentos de relevância prática [Schlichting, 1979]. Por sua vez, a simulação numérica direta (DNS, do inglês *Direct Numerical Simulation*), que resolve numericamente todas as escalas do escoamento, é restrita a problemas turbulentos relativamente simples e a números de Reynolds baixos e moderados. Portanto, abordagens simplificadas são necessárias para a simulação computacional da maioria dos escoamentos turbulentos em aplicações de engenharia. Diversas metodologias com tal objetivo estão disponíveis na literatura, incluindo a modelagem com médias de Reynolds (RANS, do inglês *Reynolds Averaged Navier-Stokes*), os métodos utilizando funções de densidade de probabilidade (PDF, do inglês *Probability Density Function*) e a simulação de grandes escalas (do inglês *Large-Eddy Simulation*, LES) [Pope, 2000].

Da mesma forma que a turbulência é o regime predominante na maioria das situações práticas de engenharia, a transferência de energia por radiação tem um papel fundamental em aplicações envolvendo troca térmica, principalmente em altas temperaturas. Exemplos podem ser encontrados no escoamento de gases de exaustão, no dimensionamento de células solares, em trocadores de calor, e em diversos sistemas de combustão, incluindo chamas, caldeiras, fornalhas, motores de combustão interna e foguetes [Viskanta e Mengüç, 1987; Siegel e Howell, 2002].

A solução do problema de transferência de calor radiativo em meios participantes – isto é, meios que podem absorver, emitir ou espalhar a energia radiativa – é muitas vezes obtida resolvendo-se a equação de transferência radiativa (RTE, do inglês *Radiative Transfer Equation*). Essa é uma equação integro-diferencial com usualmente seis variáveis independentes: três coordenadas espaciais, duas coordenadas angulares, que definem a direção de propagação da intensidade de radiação, e uma variável espectral. Além disso, é necessário computar a

dependência das propriedades radiativas do meio (que pode ser composto por mais de uma espécie química e não ser homogêneo) em relação ao comprimento de onda da radiação. A determinação dessas propriedades em geral não é simples, pois em muitos casos – como, por exemplo, para o dióxido de carbono ou o vapor de água – são compostas de centenas de linhas espectrais [Modest, 2003; Coelho, 2007]. Esses fatores combinados podem tornar até a solução de problemas relativamente simples uma tarefa bastante desafiadora.

No entanto, ainda que a turbulência e a transferência de calor por radiação sejam problemas complexos por si só, neste trabalho não se está interessado nesses fenômenos individualmente, mas sim em sua interação. Tradicionalmente, turbulência e radiação são tratadas de forma independente, usando propriedades e grandezas médias para calcular a transferência radiativa. Embora essa abordagem seja satisfatória em algumas aplicações, nas quais flutuações dos escalares são relativamente pequenas [Soufiani et al., 1990b; Mazumder e Modest, 1999b], em outros casos negligenciar flutuações turbulentas pode resultar em grandes erros; isto é, a média temporal da intensidade de radiação e dos fluxos de calor podem diferir significativamente desses mesmos valores calculados a partir da temperatura média e das concentrações médias das espécies químicas que compõem o meio. Esse fenômeno – atribuído principalmente ao acoplamento altamente não linear entre as flutuações turbulentas da intensidade radiativa e as flutuações da temperatura e concentração das espécies – é chamado de interação turbulência-radiação (TRI, do inglês *Turbulence-Radiation Interaction*) [Modest, 2005; Coelho, 2007], e é o objeto central de estudo desta dissertação. Vários estudos, que serão discutidos na próxima seção, apontam que o TRI pode ter, de fato, um efeito considerável sobre o problema radiativo.

Segundo Coelho, 2007, dois aspectos do TRI podem ser destacados e agem simultaneamente. Por um lado, os campos de escoamento e das concentrações das espécies químicas são influenciados pela radiação, pois a massa específica é uma função da temperatura local, que é por sua vez dependente da transferência de calor radiativa. Em uma análise teórica, Baum e Mell, 2000, mostraram que flutuações de temperatura de qualquer magnitude induzem flutuações no fluxo de calor radiativo e na velocidade em gases de saída de processos de combustão. Em outro estudo, foi demonstrado que a radiação em um escoamento turbulento influencia as flutuações de temperatura e modifica a estrutura do espectro de variância de temperatura [Soufiani, 1991]. Portanto, a radiação influencia a turbulência. Por outro lado, no regime turbulento, as flutuações do campo de velocidade promovem flutuações de temperatura e, em escoamentos reativos, da composição química do meio. Essas flutuações influenciam a transferência de calor por radiação, uma vez que a emissão de energia radiativa e o divergente do fluxo de calor radiativo são funções não lineares da temperatura e das concentrações das espécies. Adicionalmente, as propriedades radiativas do meio (principalmente o seu coeficiente de absorção, κ) também dependem dessas grandezas. Assim, a radiação também é influenciada pela turbulência [Coelho, 2007].

1.1 Revisão bibliográfica

Os primeiros estudos sobre a interação entre turbulência e radiação datam das décadas de 1950 e 1960 [Spiegel, 1959; Townsend, 1958; Foster, 1969]. Spiegel, 1959, e Townsend, 1958, estudaram a influência da radiação térmica na turbulência, concluindo que a radiação em escoamentos reativos, assim como na atmosfera, age como um processo dissipativo, especialmente para estruturas de grandes escalas nas quais a espessura óptica é maior. Foster, 1969, assumindo uma função de densidade de probabilidade para o coeficiente de absorção do meio, mostrou que a transmitância média de uma chama turbulenta pode ser significativamente subestimada caso as flutuações decorrentes da turbulência sejam negligenciadas, em especial para meios opticamente espessos. Esses resultados foram posteriormente confirmados através de experimentos por Amin e Foster, 1973, que realizaram medições da transmitância média de uma chama de propano, e por Tan e Foster, 1978, que mediram a transmitância média da banda 4,3 μm do dióxido de carbono.

Outros estudos da mesma época reportam efeitos consideráveis da interação turbulência-radiação. Germano, 1978, demonstrou numericamente, no primeiro estudo desse tipo sobre o tema, a existência do TRI, assumindo que as flutuações dos escalares causadas pela turbulência tinham comportamento randômico e que o meio participante era cinza. Trabalhos semelhantes mostraram, através de expansões em séries de Taylor da intensidade de radiação de corpo negro (uma função da temperatura elevada na quarta potência relacionada à emissão de energia radiativa), que grandes flutuações de temperatura podem afetar de forma significativa a emissão radiativa [Cox, 1977; Soufiani et al., 1990a]. Em um estudo analítico dos efeitos combinados das flutuações do coeficiente de absorção e da temperatura, Kabashnikov e Kmit, 1979, encontraram que o TRI pode aumentar a intensidade de radiação em fatores de dois a três em comparação ao valor calculado com base em grandezas médias. Ainda nesse trabalho os autores introduzem a aproximação de flutuações opticamente finas (OTFA, do inglês *Optically Thin Fluctuation Approximation*), que assume que o caminho livre médio para radiação térmica é muito maior que a escala integral de comprimento dos vórtices turbulentos. Essa simplificação, embora não seja discutida em detalhes nesta dissertação, é muito utilizada em investigações sobre a interação turbulência-radiação.

Embora estudos teóricos, numéricos e experimentais realizados até a década de 1980 tivessem mostrado a existência do fenômeno da interação entre radiação e turbulência, a verdadeira importância do TRI e o seu comportamento físico ainda eram poucos conhecidos, devido às simplificações dos estudos teóricos e à disponibilidade limitada de dados experimentais até aquele momento. Desde então, esforços significativos têm sido despendidos no sentido de melhorar o conhecimento sobre a interação turbulência-radiação e desenvolver metodologias numéricas para considerar esse fenômeno principalmente na simulação de escoamentos reativos [Coelho, 2007]. Nesta seção, alguns dos trabalhos sobre o tema e seus resultados mais importantes são brevemente discutidos; revisões mais detalhadas podem ser encontradas em Li e Modest,

2005, Modest, 2005, Coelho, 2007, e Coelho, 2012.

Em seu extenso trabalho de revisão bibliográfica, Coelho, 2007, observa que se encontram na literatura investigações sobre o TRI que adotam as mais diversas metodologias, não sendo possível destacar uma como superior a todas as demais. Em termos do modo como o conjunto das equações governantes do problema é resolvido, pode-se fazer o acoplamento ou não dos cálculos do escoamento e da transferência radiativa. Em soluções desacopladas, os campos de temperatura e de concentração das espécies químicas são tidos como dados de entrada – assumidos, computados de um código de dinâmica dos fluidos computacional (CFD, do inglês *Computational Fluid Dynamics*) ou obtidos experimentalmente. Por sua vez, os cálculos acoplados resolvem de forma simultânea o problema hidrodinâmico e o problema térmico (juntamente às reações químicas, quando presentes), exigindo muitas vezes um processo iterativo, que torna a metodologia mais complexa.

Quanto à solução da transferência de energia por radiação, certos cálculos desacoplados resolvem a RTE de forma direta usando dados instantâneos gerados através de um método estocástico (ver, por exemplo, Jeng et al., 1984). Essa metodologia permite maior acuracidade dos resultados às custas de maior esforço computacional; por essa razão, ela geralmente é aplicada ao cálculo da radiação ao longo de uma única trajetória ou linha de visão. Para casos em que o problema é resolvido em todo o domínio computacional, as abordagens mais utilizadas são o método de Monte Carlo [Howell, 1998], o método das ordenadas discretas (DOM, do inglês *Discrete Ordinates Method*) [Fiveland, 1984] e o método dos volumes finitos (FVM, do inglês *Finite Volume Method*) [Raithby e Chui, 1990]. Esses dois últimos métodos fazem a solução da RTE na forma temporal média (exceto nos poucos estudos que empregam a simulação numérica direta ou a simulação de grandes escalas), em geral empregando simplificações como a OTFA. Essas aproximações reduzem a acuracidade da solução, porém são concessões necessárias devido a maior complexidade das simulações, em especial se o caso considerado envolve um cálculo acoplado. Uma maior discussão sobre a média temporal da RTE e suas implicações é feita na Seção 2.6.

O método estocástico para a solução da transferência radiativa não é discutido em maiores detalhes nesta dissertação, uma vez que essa abordagem não é empregada para o estudo do TRI no presente trabalho. Como exemplo da metodologia, cita-se a série de trabalhos numéricos em chamas difusivas realizados na década de 1980 por Faeth e colaboradores, em que a RTE foi resolvida ao longo de uma única trajetória usando um método estocástico para a prescrição de dados escalares instantâneos [Jeng et al., 1984; Gore et al., 1987a; Gore et al., 1987b]. De forma geral, observou-se que a turbulência contribuiu para aumentar a intensidade de radiação espectral, embora a magnitude desse aumento dependesse do tipo de chama analisada. O efeito da turbulência foi pequeno (da ordem de 10 %) em chamas de monóxido de carbono e ar [Gore et al., 1987a], moderado (de 10 a 30 %) em chamas de metano e ar [Jeng et al., 1984], e alto (da ordem de 100 %) em chamas de hidrogênio e ar [Gore et al., 1987b].

Entre os cálculos desacoplados que resolvem a RTE temporal média, pode-se citar os

trabalhos de Krebs et al., 1994, de Hall e Vranos, 1994, de Krebs et al., 1996, de Coelho, 2002, e de Coelho, 2004, entre outros. Todos esses trabalhos utilizam-se da OTFA, seja como forma de simplificar a RTE, seja para verificar sua validade em diferentes condições.

A OTFA foi utilizada por Krebs et al., 1994, para comparar valores medidos e calculados para a intensidade de radiação espectral média e sua flutuação, para a banda de 4,3 μm do CO_2 ao longo de uma única trajetória. Os dados de entrada para o cálculo da transferência radiativa foram obtidos de um código CFD. Ainda que as comparações entre os experimentos e as simulações tenham sido qualitativas, observou-se que a média temporal da intensidade espectral foi aumentada ao considerar-se o TRI. Em um trabalho seguinte, Krebs et al., 1996, realizaram uma comparação semelhante para chamas difusivas turbulentas de propano e ar, usando dados de entrada retirados de experimentos. Foram avaliadas diferentes formas de considerar o TRI e encontrou-se que, para se ter previsões acuradas da transferência radiativa na zona de reação da chama, deve-se incluir no cálculo tanto flutuações da temperatura como flutuações da composição do meio.

Hall e Vranos, 1994 investigaram o TRI em uma chama difusiva de metano e hidrogênio, também empregando um código CFD para fornecer os dados necessários para a solução da RTE temporal média. Os resultados encontrados para a intensidade de radiação concordaram com cálculos usando um método estocástico mais sofisticado. Uma observação interessante feita pelos autores é que bandas espectrais individuais do meio participante (no caso, foi analisado apenas o vapor de água) respondem de forma diferente a flutuações de temperatura, dependendo da maneira como a intensidade de corpo negro varia com a temperatura no centro da banda.

Em seus dois estudos, Coelho, 2002, e Coelho, 2004, analisou a validade da OTFA através de comparações entre predições numéricas usando essa aproximação e a solução exata da RTE por um método estocástico, para a chama Sandia D [Barlow e Frank, 1998]. Em Coelho, 2002, a média temporal da intensidade de radiação total foi computada usando o modelo SLW para avaliar as propriedades radiativas do meio, e encontrou-se boa concordância dos resultados com os dois métodos (as diferenças máximas em termos da intensidade de radiação total média foram de 4%). Uma análise similar feita por Coelho, 2004, porém empregando os modelos espectrais SNB e CK, reporta conclusões semelhantes, com diferenças máximas de 2,5% para o modelo CK. Neste estudo foi observado ainda um aumento da intensidade de radiação média com a consideração dos efeitos do TRI.

A literatura também reporta cálculos acoplados cujo objetivo é analisar a acuracidade da aproximação de flutuações opticamente finas. Gore et al., 1992, utilizaram a OTFA em simulações acopladas de uma chama difusiva de acetileno e ar. Os resultados encontrados para a estrutura da chama e para médias temporais da temperatura e da intensidade de radiação concordaram de forma satisfatória com dados experimentais. Hartick et al., 1996, estudaram uma câmara de combustão axissimétrica com uma chama difusiva de hidrogênio e ar, usando a hipótese de gás cinza e a OTFA. Quando comparados com dados experimentais, os resultados das simulações numéricas mostraram pouca diferença, levando os autores a concluir que a OTFA

é válida para o problema estudado.

O primeiro estudo acoplado sobre o TRI foi realizado por Song e Viskanta, 1987, tratando de uma chama pré-misturada de metano e ar modelada bidimensionalmente. Observou-se que a influência do TRI nas propriedades do escoamento dentro da câmara de combustão poderia ser negligenciada, porque, embora a emissão de radiação fosse muito maior nas proximidades da chama com a inclusão dos efeitos da interação turbulência-radiação, a diferença entre os fluxos de calor totais médios nas simulações que consideram o TRI e nas simulações que o negligenciam foi de cerca de 1 % apenas. A explicação para isso está no pequeno tamanho da chama em comparação ao volume da câmara de combustão e na mistura fria de gás localizada nas proximidades do gás queimado, que absorve a radiação emitida pelos produtos da combustão. No entanto, uma análise paramétrica feita pelos autores mostrou que o efeito do TRI torna-se significativo conforme é aumentado o tamanho da chama em relação ao volume de câmara de combustão.

Na análise de uma chama difusiva de metano e ar, Mazumder e Modest, 1999a, reportam que o TRI causou um aumento no tamanho das regiões de perda de calor radiativo, fazendo a chama se espalhar mais na direção do escoamento coaxial de ar. Conseqüentemente, houve um aumento na emissão radiativa da chama, causando uma elevação de cerca de 45% do fluxo de calor nas paredes e um decréscimo da temperatura da chama em aproximadamente 100 K. Mazumder e Modest, 1999b, adotaram os mesmos modelos e a mesma metodologia do estudo anterior, mas para um escoamento não reativo de CO_2 e H_2O em partes iguais por massa. Ao comparar soluções considerando e negligenciando a interação turbulência-radiação, observou-se que esse fenômeno leva a uma contração das regiões de forte emissão no escoamento e, por consequência, a uma diminuição de aproximadamente 10 % no fluxo de calor radiativo nas paredes. Contudo, os efeitos do TRI neste caso foram significativamente menos importantes que no escoamento reativo similar analisado por Mazumder e Modest, 1999a. Segundo os autores, isso se deve ao fato de que, em chamas turbulentas, as flutuações dos escalares são muito maiores do que em problemas não reativos.

Li e Modest, 2002, também investigaram uma chama difusiva de metano e ar, e seus resultados de modo geral concordaram com os de Mazumder e Modest, 1999a. Verificou-se uma diminuição da temperatura da chama e um aumento na perda de calor radiativo quando a interação turbulência-radiação é considerada no cálculo.

Cálculos acoplados para a análise do TRI na chama Sandia D e em chamas derivadas desta foram realizados por Li e Modest, 2003, e por Modest, 2005. No primeiro trabalho, chamas artificiais baseadas na chama Sandia D foram simuladas como forma de estudar o efeito da espessura óptica sobre os resultados; no segundo trabalho, não apenas a influência da espessura óptica foi investigada, mas também a influência dos números de Reynolds, de Froude e de Damköhler. Como nos trabalhos anteriores, nesses estudos observou-se que o TRI levou a uma diminuição na temperatura da chama, sendo essa queda de temperatura maior para chamas opticamente mais espessas, e um aumento na perda de calor radiativo. Uma conclusão

interessante desses estudos é que os efeitos da interação entre turbulência e radiação foram maiores em meios cinza do que em meios não cinza.

Um trabalho similar ao de Li e Modest, 2003, foi realizado por Wang e Modest, 2007, porém empregando-se uma versão do método de Monte Carlo desenvolvida por Wang e Modest, 2006, para a solução da transferência de calor por radiação. Os resultados para simulações sem TRI subestimaram a emissão radiativa total em 16 %, porém a absorção não foi afetada de forma significativa, atestando para a aplicabilidade da OTFA no caso estudado.

Entre outros trabalhos aplicando-se o método de Monte Carlo, citam-se aqui os estudos de Snegirev, 2004, e Tessé et al., 2004. No primeiro, investigou-se a combustão de propano (em uma chama difusiva controlada por empuxo e em uma chama sobre uma poça de líquido), modelando o meio como cinza ou como não cinza – neste último caso, foi utilizado o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza – e adotando-se a OTFA. Foi empregado um modelo para a emissão de radiação de modo a contabilizar o efeito do TRI, o que aproximou os resultados para a fração radiante total a dados obtidos experimentalmente. O estudo de Tessé et al., 2004, é particularmente interessante pelo fato de a metodologia implementada dispensar a utilização da OTFA. Os autores analisaram uma chama de etileno e ar e observaram um aumento no poder emissivo global com a consideração do TRI.

Todos os estudos numéricos discutidos nesta seção até este ponto adotam a modelagem clássica da turbulência, em que apenas o escoamento médio é resolvido diretamente, incorporando ou não funções de densidade de probabilidade para a geração de certos dados turbulentos. No entanto, trabalhos recentes – particularmente, da última década e meia – têm empregado metodologias mais sofisticadas para a análise do TRI, como a simulação de grandes escalas e a simulação numérica direta. Naturalmente, devido à maior exigência computacional dessas abordagens, ainda são poucos os pesquisadores que as têm aplicado no contexto da interação turbulência-radiação [Coelho, 2007].

Análises DNS em geral são focadas na avaliação das contribuições individuais dos termos da RTE para o TRI. A primeira investigação desse tipo foi feita por Wu et al., 2005, em uma chama pré-misturada turbulenta estatisticamente unidimensional, realizando cálculos bidimensionais e tridimensionais para diferentes espessuras ópticas. Adotou-se o método de Monte Carlo para a solução da transferência radiativa, implementado com esquemas de interpolação e integração de alta ordem compatíveis com o requerimento de uma solução DNS; o meio participante foi considerado como cinza. Modest, 2005, em uma discussão estendida sobre esse trabalho, reporta que, através dos resultados obtidos, foi verificada a aplicabilidade da OTFA.

A simulação numérica direta também foi empregada no estudo de chamas não pré-misturadas por Deshmukh et al., 2007, e Deshmukh et al., 2008, utilizando-se os mesmos modelos de Wu et al., 2005. No entanto, nesses trabalhos foram realizadas apenas simulações tridimensionais. A solução do problema hidrodinâmico e do problema térmico foi feita de forma desacoplada [Deshmukh et al., 2007] ou acoplada Deshmukh et al., 2008.

Dentre as análises LES sobre o TRI, pode-se citar o trabalho de Gupta et al., 2009,

em que foram investigados escoamentos turbulentos reativos e não reativos estatisticamente estacionários e unidimensionais entre placas planas paralelas. A radiação térmica (e a combustão, quando considerada) foi resolvida de forma desacoplada ao problema hidrodinâmico, e, para o meio, assumiu-se um gás cinza com coeficiente de absorção fictício similar ao de produtos típicos da combustão de hidrogênio e ar. Para o caso não reativo, os autores reportam que as contribuições do TRI são negligenciáveis tanto para a emissão quanto para a absorção de energia radiativa, concordando com resultados de trabalhos anteriores (por exemplo, Mazumder e Modest, 1999b). Esse comportamento pode ser atribuído ao nível relativamente baixo de flutuações de temperatura, que ficaram em torno de 3 %. Por outro lado, na simulação do escoamento reativo, grandes flutuações de temperatura foram observadas e, por consequência, os efeitos do TRI foram muito mais significativos.

Malalasekera et al., 2009, estudaram a interação turbulência-radiação em uma chama de metano e hidrogênio queimando em ar. Os problemas termoquímico e hidrodinâmico foram tratados de forma desacoplada e a metodologia LES foi usada para a geração de séries de dados instantâneos. A partir desses dados, computaram-se médias temporais de temperatura e composição química do meio, cujos valores foram empregados na inicialização de novos cálculos. O TRI foi avaliado através da comparação de resultados obtidos da simulação transiente (correspondente à solução considerando as interações entre turbulência e radiação) e resultados encontrados utilizando-se valores médios de temperatura e concentração química (equivalente ao cálculo que negligencia os efeitos do fenômeno). Foram analisados os comportamentos do coeficiente de absorção médio e do termo fonte radiativo médio em alguns pontos da chama: para o primeiro, uma diferença local de 3 % foi encontrada na região onde flutuações turbulentas são consideráveis; para o segundo, a variação local máxima, dentre os pontos considerados, foi de 18 %. Segundo os autores, como a chama simulada no trabalho não é fortemente radiante, é possível que as contribuições do TRI sejam muito mais significativas em chamas luminosas.

No trabalho de Poitou et al., 2012, empregou-se LES para calcular explicitamente as contribuições do TRI sobre todo o domínio computacional em uma chama pré-misturada de propano e ar. A mesma metodologia de Malalasekera et al., 2009 para a obtenção de resultados incluindo e negligenciando o TRI foi adotada, porém fez-se o acoplamento dos problemas hidrodinâmico e termoquímico. Os autores encontraram que o fenômeno leva a um aumento na perda de calor total em 7,4 % e que, em certos pontos, desvios do termo fonte radiativo chegam a 20 %.

Em Gupta et al., 2013, uma investigação da chama Sandia D em diferentes configurações é apresentada, utilizando-se o método Monte Carlo para o cálculo da radiação térmica e o método linha-por-linha para a determinação das propriedades radiativas do meio. Resolveu-se diretamente 84 % da energia cinética turbulenta do escoamento empregando-se LES com o modelo de Smagorinsky. Cálculos acoplados transientes e análises a partir de campos congelados de partículas foram realizados de modo a contabilizar a importância de cada correlação que compõe o TRI na emissão e na absorção de energia radiativa. Como em outros estudos já

discutidos nesta seção, a inclusão do TRI levou a um aumento na fração radiante.

Santos et al., 2014, investigaram um escoamento não reativo de um gás cinza, comparando resultados obtidos com a modelagem clássica da turbulência e com a simulação de grandes escalas para as médias temporais dos fluxos de calor convectivo e radiativo nas paredes. Para espessuras ópticas mais finas (menores que a unidade), as duas metodologias obtiveram fluxos de calor médios bastante similares, tanto para a convecção como para a radiação. Isso levou os autores a concluir que os efeitos do TRI são negligenciáveis nesses casos, o que concorda com resultados de outros estudos sobre escoamentos não reativos [Mazumder e Modest, 1999b; Gupta et al., 2009]. Contudo, para meios opticamente espessos (espessura óptica igual a 10), divergências máximas de 17,9 % foram observadas para o fluxo de calor radiativo médio superficial. Para a maior espessura óptica considerada, igual a 100, encontraram-se diferenças máximas de 18,4 % e 26 % para o fluxo médio radiativo e para o fluxo médio convectivo, respectivamente. Segundo os autores, uma possível explicação para o fato de os resultados para maiores espessuras ópticas não estarem de acordo com o que é reportado por Mazumder e Modest, 1999b, e por Gupta et al., 2009, é que nestes trabalhos a intensidade das flutuações turbulentas do escoamento é mais baixa – em Gupta et al., 2009, a intensidade de turbulência gerada ao longo do domínio é de aproximadamente 3 %, enquanto nas simulações realizadas por Santos et al., 2014, é imposta uma intensidade de turbulência de 10 % (no trabalho de Mazumder e Modest, 1999b, esse parâmetro não é informado).

Uma análise LES de um escoamento não reativo de ar em um duto de seção retangular foi feita por Velasco, 2014. O ar foi modelado como um gás ideal cinza e as simulações foram realizadas para diferentes valores do coeficiente de absorção, de forma a ter-se diferentes espessuras ópticas, e para diferentes intensidades de turbulência na entrada do duto. A metodologia para a avaliação dos efeitos do TRI foi similar àquela adotada por Malalasekera et al., 2009, e por Poitou et al., 2012. Comparando-se resultados obtidos das simulações transientes com aqueles encontrados pelos cálculos radiativos inicializados com campos médios de temperatura e velocidade, observaram-se diferenças de somente cerca de 2 % para o fluxo de calor radiativo médio nas paredes, o que levou o autor a concluir que o TRI não tem participação importante no problema considerado.

1.2 Objetivos e contribuição do trabalho

A interação entre turbulência e radiação é um fenômeno reconhecidamente importante em certas situações envolvendo escoamentos turbulentos em altas temperaturas. Conforme apresentado na seção anterior, diversos estudos apontam que, ao se negligenciar o TRI, pode-se incorrer em erros consideráveis nos valores médios de parâmetros ligados à radiação térmica, tais como a intensidade de radiação, o fluxo de calor radiativo nas paredes e o termo fonte radiativo. No entanto, pelo fato de a turbulência e a radiação térmica serem ambos processos altamente complexos, a consideração dos efeitos do TRI em sua totalidade através de simulações

numéricas exige um esforço computacional excessivamente elevado. Portanto, em aplicações nas quais a transferência de calor por radiação tem papel significativo (como em trocadores de calor e câmaras de combustão, por exemplo), é fundamental identificar qual é a magnitude dos TRI e, caso ele não se mostre desprezível, ter uma forma de contabilizá-lo por metodologias que não demandem computações muito dispendiosas.

Inserida nesse contexto, esta dissertação apresenta um estudo de caráter fundamental sobre o TRI. O seu objetivo central é analisar a influência da consideração ou não da dependência espectral das propriedades radiativas do meio na interação entre turbulência e radiação em um escoamento interno não reativo de um gás participante composto por uma única espécie química. Essa análise é feita através de cálculos numéricos executados em um código baseado na dinâmica dos fluidos computacional, utilizando a simulação de grandes escalas para a geração de campos transientes e os modelos espectrais do gás cinza (GG, do inglês *Gray Gas*) e da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG, do inglês *Weighted-Sum-of-Gray-Gases*) para a avaliação das propriedades radiativas. Além da influência da dependência espectral sobre o TRI, a importância desse fenômeno é analisada para um conjunto de casos, em que se considera diferentes espécies químicas para a composição do fluido de trabalho e valores distintos de intensidade de turbulência na entrada do escoamento. Finalmente, é proposto e testado um fator de correção para contabilizar os efeitos da interação turbulência-radiação em um escoamento homogêneo modelado com a soma-ponderada-de-gases-cinza.

O trabalho realizado aqui é uma continuação direta do estudo de Velasco, 2014; adota-se a mesma geometria do duto retangular dentro do qual o escoamento se desenvolve e, de forma geral, as mesmas condições de contorno e condições iniciais. No entanto, diversos avanços são atingidos em relação àquele trabalho, tais como a adição de novos modelos espectrais, o refino da condição de contorno turbulenta na entrada do escoamento, o monitoramento de mais grandezas radiativas médias para a análise do TRI e a introdução de metodologias alternativas para a avaliação das contribuições do fenômeno. O código numérico utilizado é também o mesmo que o empregado por Velasco, 2014, porém várias modificações e aprimoramentos são implementados.

O presente trabalho consiste em uma das primeiras investigações em nível fundamental sobre o TRI desenvolvidas dentro do grupo de estudos de radiação térmica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), e está inserido em um esforço maior na direção de compreender esse fenômeno em diversas aplicações. Entre os trabalhos anteriores do grupo de pesquisa sobre o tema, pode-se citar as teses de Santos, 2011, e de Centeno, 2014, além da dissertação de Velasco, 2014, mencionada anteriormente. Portanto, o conhecimento da interação turbulência-radiação dentro do grupo ainda está em um estágio inicial. Por essa razão, opta-se por não incluir a modelagem de reações químicas, que não é uma tarefa trivial, nas simulações realizadas. Apesar disso, como a combustão não introduz termos adicionais às equações básicas que governam o TRI, a metodologia desenvolvida nesta dissertação pode ser aplicada (com algumas ressalvas) a problemas reativos.

A escolha da simulação de grandes escalas para a descrição da turbulência é motivada pela capacidade dessa metodologia de prover dados instantâneos de todos os campos e de todas as grandezas de interesse do problema, a partir dos quais uma análise do TRI pode ser conduzida. O método adotado para tal análise é semelhante ao que é empregado em outros estudos [Malalasekera et al., 2009; Poitou et al., 2012; Velasco, 2014]. O presente trabalho introduz também uma nova metodologia com tal finalidade, cujos resultados e significado físico são discutidos. São abordadas, ainda, as formas de avaliar diferenças percentuais entre as soluções calculadas considerando e negligenciando o TRI, um assunto que raramente é tratado na literatura.

A inclusão ou não das variações espectrais na avaliação das propriedades radiativas do meio é feita através da utilização dos modelos GG e WSGG. Para o modelo do gás cinza, em que é assumido que o coeficiente de absorção do gás participante é independente do comprimento de onda da radiação térmica, duas versões são estudadas: em uma, κ é uma função da temperatura local [Cassol et al., 2015], e, na outra, é constante sobre todo o domínio computacional (uma abordagem similar àquela adotada por Velasco, 2014). O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza [Hottel e Cohen, 1958], por sua vez, permite contabilizar a dependência espectral do coeficiente de absorção na solução do problema radiativo. A escolha deste modelo, dentre as várias modelagens espectrais alternativas disponíveis na literatura, se dá pela sua simplicidade, facilidade de implementação e pelo baixo custo computacional associado a ele, compatível com os requisitos de cálculos acoplados como os realizados nesta dissertação; além disso, conforme reportado por estudos recentes que empregam correlações atualizadas (por exemplo, Kangwanpongpan et al., 2012, Dorigon et al., 2013, e Cassol et al., 2014), o modelo WSGG tem apresentado resultados bastante satisfatórios quando comparado com soluções exatas em diversos tipos de situações.

Todas as simulações são realizadas no código de volumes finitos *Fire Dynamics Simulator*, ou FDS, em uma malha computacional tridimensional, retilínea e uniforme. O FDS resolve numericamente uma forma apropriada para baixos números de Mach das equações do balanço de massa, balanço de quantidade de movimento e balanço de energia [Rehm e Baum, 1978; McGrattan et al., 2015a]. O algoritmo de solução consiste em um esquema preditor-corretor explícito de segunda ordem tanto no espaço como no tempo [McGrattan et al., 2015b]. A modelagem da turbulência na escala submalha é tratada com o modelo de Smagorinsky dinâmico [Germano et al., 1991; Lilly, 1992] e, para a solução da equação da transferência radiativa, o método dos volumes finitos é empregado [Raithby e Chui, 1990].

Uma vantagem que motiva o emprego do *Fire Dynamics Simulator* é o fato de ele ser um código aberto para a edição e compilação por qualquer usuário. Ou seja, todas as suas rotinas, escritas na linguagem de programação Fortran, podem ser modificadas de maneira a implementar quaisquer novos recursos que sejam necessários para a pesquisa. Entre as alterações aplicadas ao código-base no presente trabalho incluem-se a adição do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza, da função que permite calcular o coeficiente de absorção do meio em função apenas

da temperatura no modelo do gás cinza e a computação das médias temporais dos campos de velocidade e de temperatura e de todas as grandezas radiativas de interesse.

Assim, o trabalho apresentado neste texto trata de um estudo-base sobre a interação turbulência-radiação, um tema de grande relevância prática em muitas aplicações e cujo entendimento ainda não é completo. As principais contribuições da pesquisa estão na implementação do modelo WSGG em um código LES para cálculos tridimensionais acoplados visando analisar o TRI em diversos casos e, mais especificamente, analisar como o fenômeno e a variação espectral das propriedades radiativas do meio estão correlacionados; na elaboração e discussão de diferentes metodologias para a avaliação dos efeitos do TRI, tanto em termos da forma como são geradas as soluções incluindo e negligenciando o fenômeno, como em relação à maneira como são definidas as diferenças percentuais entre essas soluções; e na introdução de um fator de correção para o termo fonte radiativo, que permite contabilizar as contribuições do TRI sem resolvê-lo diretamente.

1.3 Organização do texto

O presente trabalho é dividido em seis capítulos principais. Neste primeiro capítulo, é feita uma introdução sobre a interação turbulência-radiação, apresentando os principais estudos já realizados sobre o tema e seus resultados mais relevantes. Os objetivos desta dissertação são introduzidos, assim como os modelos implementados e a metodologia adotada.

No segundo capítulo, é abordada a fundamentação física e matemática do problema analisado, incluindo uma exposição das equações fundamentais que regem o escoamento, a descrição de todos os modelos empregados e uma discussão sobre como o TRI se manifesta nas expressões médias da RTE, do fluxo de calor radiativo superficial e do termo fonte radiativo. A maneira como essa teoria é implementada numericamente é descrita no Capítulo 3; nesse capítulo, é feita uma apresentação do código numérico utilizado e uma discussão sobre como cada equação fundamental é tratada no algoritmo de solução.

O Capítulo 4 detalha a metodologia adotada para as simulações computacionais realizadas nesta dissertação. São incluídos nesse capítulo as descrições da geometria modelada e das condições de contorno impostas, os resultados da análise da qualidade das discretizações espacial, temporal e angular, a listagem dos casos simulados e a exposição da metodologia de avaliação dos efeitos do TRI. Os resultados encontrados da aplicação dessa metodologia são apresentados no quinto capítulo; isso envolve, além da análise da importância do TRI nos diferentes casos considerados, discussões sobre a forma como o fenômeno é computado e sobre a maneira como são definidas as diferenças entre as soluções considerando-o e negligenciando-o, e a introdução de um fator de correção para contabilizar a interação turbulência-radiação no modelo WSGG. Finalmente, o Capítulo 6 reúne as principais conclusões desta dissertação e traz sugestões para trabalhos futuros sobre o tema.

Além disso, ao final do texto, podem ser encontradas as referências bibliográficas citadas

ao longo do trabalho e os apêndices com informações adicionais sobre a pesquisa realizada.

2 FUNDAMENTAÇÃO FÍSICA E MATEMÁTICA

Neste capítulo são descritos o equacionamento e a teoria que regem o problema analisado nesta dissertação e que fundamentam a modelagem numérica que é discutida no Capítulo 3. Deduções das equações tratadas neste capítulo não são apresentadas aqui, podendo ser encontradas em livros especializados.

Todas as equações introduzidas neste e nos subsequentes capítulos consideram o sistema de coordenadas cartesianas com as direções principais denominadas x , y e z , ou, em notação indicial, x_1 , x_2 e x_3 . Grandezas escritas em negrito representam vetores.

2.1 Equações fundamentais

As equações apresentadas nesta seção têm como objetivo descrever um escoamento tridimensional, transiente e não isotérmico de um fluido newtoniano compressível. Para um problema genérico, têm-se como incógnitas o vetor velocidade \mathbf{u} ,

$$\mathbf{u} = \mathbf{i}u + \mathbf{j}v + \mathbf{k}w \quad (2.1)$$

onde u , v e w são as componentes ortogonais da velocidade, a massa específica ρ , a pressão p , e a temperatura T , todas concebidas como funções das coordenadas espaciais x , y e z e do tempo t . Para a determinação dessas seis quantidades, tem-se disponíveis a equação da continuidade (conservação de massa), as três equações do movimento (balanço da quantidade de movimento), a equação da energia (primeira lei da termodinâmica) e a equação de estado [Schlichting, 1979].

A equação da continuidade expressa o fato de que, para um volume infinitesimal arbitrário, existe um balanço entre as taxas de massa que entram e deixam o volume e a variação temporal da massa específica. Para o caso de um escoamento transiente de um fluido compressível isso leva à equação:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.2)$$

onde u_i é a componente de velocidade na direção i e x_i é a coordenada espacial na direção i . Nesta equação, assim como nas demais deste capítulo, utiliza-se a notação indicial com a convenção de Einstein para a soma, em que índices repetidos são implicitamente somados [Schlichting, 1979].

As equações do balanço de quantidade de movimento são obtidas através de um balanço de forças em um volume infinitesimal – ou seja, da aplicação da segunda lei de Newton em sua

formulação para volumes de controle [Schlichting, 1979]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = X_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (2.3)$$

onde X_i é a componente da força de corpo na direção i (por exemplo, a força gravitacional atuando nessa direção), μ é a viscosidade dinâmica do fluido e δ_{ij} é o operador delta de Kronecker ($\delta_{ij} = 1$ para $i = j$ e $\delta_{ij} = 0$ para $i \neq j$). As equações representadas pela expressão vetorial dada na Eq. (2.3) são também conhecidas como as equações de Navier-Stokes.

Similarmente, a equação da energia é obtida de um balanço de energia em um volume de controle, relacionando a taxa de acúmulo de energia no volume, a taxa líquida de energia transferida pelo escoamento, a taxa líquida de calor trocado por condução e por radiação, a taxa de geração interna de energia e a taxa líquida de trabalho transferido do volume de controle para o ambiente [Bejan, 2004]. Expressando esse balanço em termos da energia interna específica e , tem-se

$$\rho \left(\frac{\partial e}{\partial t} + u_i \frac{\partial e}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + q''' + S_r - p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \mu \Phi \quad (2.4)$$

onde λ é a condutividade térmica; q''' é a taxa volumétrica (isto é, por unidade de volume) de geração de energia interna; S_r é a contribuição volumétrica da radiação térmica à equação da energia, denominado termo fonte radiativo e definido na Seção 2.4.4; e Φ é a dissipação viscosa, definida na Eq. (2.5).

$$\Phi = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right)^2 \quad (2.5)$$

A equação da energia também pode ser formulada em termos da entalpia sensível h_s , conforme mostrado na Eq. (2.6). Essa equação é apresentada aqui por ser a partir dela que se deduz a expressão para o divergente de velocidade, que é forma como o código numérico empregado nesta dissertação resolve a equação da energia, conforme é discutido na Seção 3.4 [McGrattan et al., 2015b].

$$\rho \left(\frac{\partial h_s}{\partial t} + u_i \frac{\partial h_s}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + q''' + S_r + \left(\frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) + \mu \Phi \quad (2.6)$$

Por fim, uma equação de estado é qualquer equação constitutiva que forneça uma relação matemática entre duas ou mais funções de estado associadas a uma substância, tais como sua pressão, sua temperatura, seu volume específico ou sua energia interna. Além disso, também

podem ser chamadas de equações de estado as relações para a determinação de propriedades a partir de outras propriedades de uma substância em estado de equilíbrio. Diversas formas de equações de estado para diferentes tipos de fluidos são conhecidas, sendo a mais simples e talvez mais conhecida a equação de estado para os gases ideais [Borgnakke e Sonntag, 2013; Çengel e Boles, 2015]:

$$p = \frac{\rho RT}{\mathcal{M}} \quad (2.7)$$

onde R é a constante universal dos gases (8,3145 kJ/(kmol K)) e \mathcal{M} é a massa molar do gás. Embora o escoamento simulado nesta dissertação envolva substâncias reais, as altas temperaturas e pressões moderadas dos casos analisados permitem a consideração dessas espécies como gases ideais sem a introdução de erros significativos, e, portanto, a utilização da Eq. (2.7) como equação constitutiva [Borgnakke e Sonntag, 2013]. Essa, inclusive, é a abordagem recomendada no manual do código utilizado para os cálculos numéricos no presente trabalho [McGrattan et al., 2015a].

2.2 Modelagem da turbulência

Nesta seção são apresentadas as principais técnicas usadas para a modelagem da turbulência. O foco desta dissertação é a simulação de grandes escalas, de modo que naturalmente a este tópico é dada mais atenção. No entanto, com fins de completude e para se ter referências com as quais comparar a análise LES em seus aspectos positivos e negativos, uma breve descrição das duas outras abordagens mais comuns de modelagem da turbulência também é feita nesta seção.

2.2.1 Simulação numérica direta (DNS)

A simulação numérica direta de um escoamento turbulento consiste na solução numérica das equações de Navier-Stokes sem qualquer hipótese de modelagem. Todas as escalas do movimento são resolvidas pela malha e as únicas fontes de erro provêm do método numérico utilizado. O valor de tal simulação é evidente: detalhes precisos de parâmetros da turbulência podem ser obtidos em qualquer ponto do domínio, podendo ser utilizados para o desenvolvimento e para a validação de novos modelos de turbulência; pode-se gerar dados instantâneos que não são possíveis de mensurar com instrumentação; estruturas transientes da turbulência podem ser visualizadas e examinadas; e é possível realizar estudos fundamentais de turbulência em escoamentos virtuais (que não ocorrem na realidade) pela inclusão ou exclusão de aspectos individuais da física do escoamento [Wilcox, 1994; Moin e Mahesh, 1998].

Entretanto, como consequência da necessidade de resolver todas as escalas de movi-

mento, a maior dificuldade da realização de uma análise DNS reside na ampla gama de escalas que devem ser simuladas. É requerido um nível de discretização muito fino, tanto da malha numérica espacial como do passo de tempo. Por exemplo, para regiões do escoamento longe da parede, estima-se que, em uma malha uniforme para a solução de um problema tridimensional cujas dimensões da geometria são da mesma ordem que as escalas de comprimento dos maiores vórtices do escoamento, o número de volumes necessários é proporcional a $Re^{9/4}$, onde Re é o número de Reynolds; esse valor é ainda maior para escoamentos próximos a superfícies [Versteeg e Malalasekera, 2007; Jarrin, 2008]. Adicionalmente, o passo de tempo δt da simulação deve ser suficientemente pequeno para capturar as frequências mais altas do escoamento, e o cálculo transiente deve compreender um período de tempo P longo o bastante para terem-se resultados significativos para os valores médios e as estatísticas da turbulência. Segundo Jarrin, 2008, a razão $P/\delta t$ é proporcional a $Re^{3/4}$, de modo que o custo computacional total de uma análise DNS é da ordem de Re^3 .

Devido a essa elevada exigência de resolução numérica, aplicações de DNS têm se limitado à simulação de escoamentos turbulentos com baixos números de Reynolds [Versteeg e Malalasekera, 2007]. Dentro do contexto da interação turbulência-radiação, recentemente alguns trabalhos têm sido desenvolvidos utilizando a metodologia da simulação numérica direta – por exemplo, Wu et al., 2005, Deshmukh et al., 2007, e Deshmukh et al., 2008. No entanto, esses estudos se restringem a problemas simples, em geral de turbulência estatisticamente unidimensional simulada em malhas bidimensionais.

2.2.2 Modelagem com médias de Reynolds (RANS)

Na maior parte das aplicações em engenharia não é necessário resolver os detalhes das flutuações da turbulência, sendo suficiente o levantamento de informações sobre as médias temporais de quantidades do escoamento (por exemplo, do campo de velocidade e de pressão). Sob essa ótica, no lado oposto do espectro em relação à DNS, tanto em termos de custo computacional como em termos da capacidade de resolução das escalas da turbulência, encontra-se a simulação com médias de Reynolds. Chamada também de modelagem clássica da turbulência, nessa abordagem as equações fundamentais do escoamento são resolvidas numericamente após a aplicação de uma média temporal, deixando em evidência as grandezas médias do escoamento. Uma consequência desse processo, contudo, é a introdução de seis novas incógnitas adicionais no sistema de equações, o que leva ao chamado problema de fechamento. Portanto, é necessário o desenvolvimento de modelos de turbulência que estabeleçam maneiras de calcular essas novas grandezas com base em quantidades (médias) resolvidas do escoamento [Wilcox, 1994; Versteeg e Malalasekera, 2007]. Quando o processo de médias de Reynolds é aplicado a outras equações, como a equação da energia ou a equação de transferência radiativa (RTE), geralmente a modelagem envolve negligenciar certos termos para a solução do sistema, como é discutido na Seção 2.6.

A análise RANS tem sido muito bem sucedida na indústria principalmente por seu baixo custo computacional, inerente ao fato de nessa abordagem apenas o escoamento médio ser resolvido. Entretanto, uma limitação natural sua é que somente uma imagem média do escoamento é obtida. Por exemplo, para aplicações em que o foco está nos detalhes da estrutura e na variação temporal da turbulência, a simulação de grandes escalas (discutida na próxima subseção) já tem suplantado RANS [Versteeg e Malalasekera, 2007]. Além disso – de especial interesse nesta dissertação –, em problemas envolvendo radiação e turbulência, a abordagem RANS resulta em diferenças em relação ao problema físico que em certos casos podem ser significativos, principalmente quando são incluídos ainda os efeitos da combustão [Coelho, 2007].

2.2.3 Simulação de grandes escalas (LES)

Tendo em vista as vantagens e desvantagens das duas metodologias de modelagem da turbulência apresentadas anteriormente, a simulação de grandes escalas visa ser uma solução intermediária entre a simulação direta e a simulação com médias de Reynolds. Na abordagem LES, as estruturas turbulentas de grande escala, responsáveis pelo transporte de energia e de quantidade de movimento, são obtidas diretamente da solução das equações do movimento filtradas no espaço, enquanto as pequenas escalas são modeladas Wilcox 1994.

Como em LES as menores escalas de vórtices não são resolvidas, o comprimento destas não é um limitante para as dimensões dos volumes da malha computacional, e, conseqüentemente, maiores passos de tempo também podem ser adotados. O resultado é que essa metodologia reduz a demanda computacional em relação ao custo proibitivo da simulação numérica direta, permitindo a simulação de escoamentos com números de Reynolds muito mais elevados – como exemplo, estima-se que, em DNS de um problema com turbulência isotrópica a altos números de Reynolds, 99 % do esforço numérico é empregado para resolver as pequenas escalas em dissipação, que são modeladas na simulação de grandes escalas [Wilcox, 1994; Pope, 2000].

Por outro lado, a abordagem LES atende a uma das principais limitações das simulações RANS, que é o desenvolvimento de um modelo geral adequado para uma ampla variedade de aplicações. Em grande parte, essa dificuldade da metodologia RANS se dá devido às diferenças no comportamento das grandes e pequenas escalas. Enquanto as pequenas escalas são quase isotrópicas e possuem um comportamento universal (pelo menos para escoamentos turbulentos com número de Reynolds suficientemente alto), as grandes escalas, que interagem com e extraem energia do escoamento médio, são mais anisotrópicas e seu comportamento é ditado pela geometria do problema, pelas condições de contorno e pelas forças de corpo. Porém, quando equações do movimento com médias de Reynolds são utilizadas, o comportamento coletivo de todos os vórtices deve ser descrito por um único modelo de turbulência, e a dependência do problema com os maiores vórtices torna muito difícil a busca por modelos de maior generalidade. Em LES essa dificuldade é contornada, fazendo o cálculo transiente dos vórtices de maior

escala e modelando apenas os pequenos vórtices, cujo comportamento é teoricamente mais fácil de ser capturado com um modelo compacto [Versteeg e Malalasekera, 2007].

A simulação de grandes escalas teve sua origem na comunidade meteorológica com o trabalho pioneiro de Smagorinsky, 1963. A primeira análise LES de um escoamento prático de engenharia foi realizado por Deardorff, 1970, para um escoamento interno totalmente desenvolvido. Com o aumento do poder computacional, nas décadas de 1980 e 1990 houve um aumento no número de análises LES realizadas, pelo menos dentro da comunidade científica. No entanto, para a época, o custo computacional da abordagem ainda era excessivamente alto para aplicações realísticas de engenharia, de modo que os problemas resolvidos tratavam de geometrias simples e estudos fundamentais, como em escoamentos com baixos números de Reynolds [Moin e Kim, 1982; Piomelli e Liu, 1995], turbulência isotrópica [Lesieur e Rogallo, 1989] e escoamentos simples com separação [Kaltenbach et al., 1999], entre outros. Contudo, desde os anos de 1990, o número de aplicações e problemas resolvidos com LES está em crescimento contínuo, inclusive na indústria, especialmente em áreas em que detalhes estruturais dos vórtices ou em que o transiente da turbulência são de interesse principal – por exemplo, na análise de flutuações de pressão para prever ruído acústico [Wang e Moin, 2000] e em problemas de transferência de calor para prevenir fadiga térmica [Ničeno et al., 2002].

Dentro do contexto desta dissertação, simulações de grandes escalas têm sido utilizadas em trabalhos recentes para a análise da interação turbulência-radiação, principalmente na geração de dados transientes dos campos de temperatura e de composição química, como nos estudos de Gupta et al., 2009, Malalasekera et al., 2009, Poitou et al., 2012, Gupta et al., 2013, Santos et al., 2014, e Velasco, 2014. Conforme discutido na Seção 1.1, esses dados podem ser empregados para efetuar comparações com resultados médios obtidos por RANS, para análise da importância individual de correlações entre termos de flutuação ou para a elaboração de correções da RTE para simulações RANS. Nesta dissertação, a abordagem LES é escolhida justamente por sua capacidade de prover resultados instantâneos das grandezas de interesse com menor custo computacional que a simulação numérica direta. A maneira como esses dados são usados na análise do TRI no presente trabalho é discutida na Seção 4.4.

2.3 O formalismo LES

Na Seção 2.2.3, a simulação de grandes escalas foi apresentada, suas vantagens e desvantagens foram brevemente discutidas, justificando o seu emprego nas análises numéricas realizadas nesta dissertação, e alguns dos trabalhos que utilizam essa metodologia foram citados, em especial aqueles tratando de análises do TRI. Nesta seção, a teoria em que se baseia essa técnica é descrita de forma sucinta. Uma discussão mais detalhada sobre o equacionamento e a fundamentação física da modelagem LES pode ser encontrada em livros sobre o tema, como em Pope, 2000, e Lesieur, 2008.

2.3.1 Filtragem espacial

Na modelagem LES, a separação das grandes e pequenas escalas da turbulência se dá pela aplicação de uma operação de filtragem espacial. Leonard, 1974, define essa operação de forma generalizada como uma convolução entre a variável a ser filtrada, ϕ , e a função filtro, G :

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, \Delta) \phi(\mathbf{x}, t) d^3 \boldsymbol{\xi} \quad (2.8)$$

onde \mathbf{x} é o vetor posição, $\boldsymbol{\xi}$ é um vetor arbitrário de integração, Δ é o tamanho característico do filtro, e a barra indica uma variável filtrada. O tamanho do filtro caracteriza a frequência de corte da filtragem, ou seja, a escala mínima de comprimento dos vórtices que é resolvida; vórtices menores que Δ são modelados. No presente trabalho, o tamanho do filtro é definido em função da discretização da malha computacional, $\Delta = (\delta x \delta y \delta z)^{1/3}$, onde δx , δy e δz são as dimensões do volume finito nas direções dos eixos coordenados [McGrattan et al., 2015b].

Nesta dissertação, utiliza-se um filtro do tipo caixa, também conhecido como *top-hat*, muito usual em implementações de volumes finitos em LES [Versteeg e Malalasekera, 2007]. Esse filtro é dado por:

$$G(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, \Delta) = \begin{cases} 1/\Delta^3 & \text{se } |\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}| \leq \Delta/2 \\ 0 & \text{se } |\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}| > \Delta/2 \end{cases} \quad (2.9)$$

Para problemas em que a massa específica pode variar, é conveniente definir um outro processo de filtragem, conhecido como filtro Favre, que permite separar correlações cruzadas entre ρ e outras grandezas. Esse filtro é definido como [Jones e Whitelaw, 1982; Poinso e Veynante, 2005]:

$$\tilde{\phi}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho G(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, \Delta) \phi(\mathbf{x}, t) d^3 \boldsymbol{\xi} \quad (2.10)$$

onde ϕ é novamente uma variável genérica e o sinal til sobre esta indica que ela é filtrada pelo filtro Favre.

2.3.2 Equações fundamentais filtradas

A aplicação do processo de filtragem espacial às equações do movimento, Eqs. (2.2) e (2.3), leva, respectivamente, a:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \bar{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j) = \bar{X}_i - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (2.12)$$

Os termos $\bar{\rho} \bar{u}_i$ e $\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j$ encontrados nas equações anteriores não são variáveis primitivas – ou seja, não são termos que podem ser determinados diretamente da solução das equações fundamentais filtradas espacialmente –, exigindo, portanto, um tratamento especial. A massa específica pode ser retirada da correlação com a velocidade empregando-se a filtragem de Favre introduzida anteriormente. Procedendo-se dessa maneira, as Eqs. (2.11) e (2.12) podem ser reescritas como, respectivamente

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \widetilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \widetilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j) = \bar{X}_i - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (2.14)$$

A correlação cruzada entre as componentes de velocidade é incorporada no termo do tensor de tensões submalha, τ_{ij}^{sgs} , definido na Eq. (2.15). Fisicamente, as tensões na escala submalha representam a dissipação turbulenta nas escalas não resolvidas [Law, 2006]. Seu tratamento é feito a partir da hipótese, proposta por Boussinesq, de que as tensões submalha são proporcionais à taxa de deformação do escoamento (filtrado), agindo de forma análoga às tensões viscosas. Assim, introduzindo-se o conceito de viscosidade turbulenta, μ_T , o tensor de tensões submalha pode ser aproximado, para um escoamento compressível, pela Eq. (2.16) [Poinsot e Veynante, 2005].

$$\tau_{ij}^{sgs} = \bar{\rho} (\widetilde{u}_i \widetilde{u}_j - \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j) \quad (2.15)$$

$$\tau_{ij}^{sgs} - \frac{\delta_{ij}}{3} \tau_{kk}^{sgs} = -\mu_T \left[\left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} \right] \quad (2.16)$$

A contribuição isotrópica τ_{kk}^{sgs} na Eq. (2.16), correspondente ao dobro da energia cinética

turbulenta (por unidade de volume), em geral é incorporada ao termo de pressão filtrada, \bar{p} , nas equações de Navier-Stokes. Assim, o termo de pressão modificada (e filtrada), \bar{p}^* , é definido como [Poinsot e Veynante, 2005; McGrattan et al., 2015b]:

$$\bar{p}^* = \bar{p} + \tau_{kk}^{sgs} \quad (2.17)$$

Com as definições introduzidas nos últimos parágrafos – nominalmente, o filtro espacial e o filtro de Favre, o tensor de tensões submalha e o termo de pressão modificado – pode-se chegar enfim à forma final das equações do movimento em LES para um escoamento em que a massa específica não é necessariamente constante. Enquanto o balanço de massa para esse caso é dado na Eq. (2.13), o balanço de quantidade de movimento tem a forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j) = \bar{X}_i - \frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_T) \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (2.18)$$

Para manter o rigor físico da modelagem, a filtragem das equações da energia e de estado também deve ser feita. Isso leva ao surgimento de novos termos, similares às correlações $\overline{\rho u_i}$ e $\overline{\rho u_i u_j}$ nas Eqs. (2.11) e (2.12), que não podem ser resolvidos de forma direta – por exemplo, correlações entre entalpia específica e cada componente de velocidade, na filtragem da Eq. (2.6). Contudo, esses procedimentos de filtragem não são apresentados, pois os termos adicionais introduzidos nas equações da energia e de estado são negligenciados no algoritmo de solução numérica utilizado nesta dissertação. Assim, todas as variáveis filtradas que existiriam nas equações da energia e de estado (com exceção da massa específica) são tomadas como sendo iguais aos seus valores locais [McGrattan et al., 2015b].

2.3.3 Modelo de Smagorinsky dinâmico

A modelagem convencional da turbulência para os termos submalha na simulação de grandes escalas envolve, em geral, constantes *ad hoc*, ou seja, parâmetros definidos especificamente para determinado problema e cuja aplicação em outras configurações de escoamento pode levar a erros. Como forma de contornar essa dificuldade, foi proposta a computação dinâmica dos coeficientes do modelo de Smagorinsky [Smagorinsky, 1963], também chamada simplesmente de modelo de Smagorinsky dinâmico. Nesse modelo, introduzido por Germano et al., 1991, e posteriormente modificado por Lilly, 1992, os coeficientes de proporcionalidade não são mais constantes, mas sim funções que se ajustam ao escoamento no tempo e no espaço [Sagaut, 2006].

A definição dessas funções é feita a partir da utilização de dois filtros, de comprimentos característicos Δ distintos, para a aplicação do processo de filtragem às equações de Navier-

Stokes. No primeiro, as dimensões da malha espacial são utilizadas para o cálculo de Δ , enquanto o segundo filtro emprega um múltiplo das dimensões da discretização para definir o comprimento característico [Freire et al., 2002].

Um detalhamento do equacionamento que compõe o modelo dinâmico foge do escopo desta dissertação, então não é apresentado aqui, podendo ser encontrado nos trabalhos originais ou em livros sobre o tema (por exemplo, Freire et al., 2002, e Sagaut, 2006). Em análises LES da interação turbulência-radiação, esse modelo tem sido utilizado em alguns estudos, como em Santos et al., 2014, e Velasco, 2014. Neste último estudo, inclusive, foi feita uma avaliação do modelo dinâmico em um escoamento similar ao estudado nesta dissertação, comparando-o com o modelo de Smagorinsky convencional (com coeficientes constantes) e com resultados da literatura, e verificou-se que o modelo dinâmico apresenta melhores resultados que o modelo padrão, com menores erros em relação a dados experimentais.

2.3.4 Método dos vórtices sintéticos (SEM)

Além da escolha de um modelo de turbulência apropriado de modo a bem representar o problema físico a ser simulado, como discutido na Seção 2.2, outra questão de grande importância é a especificação de condições de contorno realistas, em especial na seção de entrada do domínio. Para simulações RANS, perfis simples para a velocidade média e para variáveis da turbulência, obtidos de forma analítica ou experimental, são geralmente impostos [Wilcox, 1994]. No entanto, para análises LES ou DNS em que o escoamento na seção de entrada é turbulento, a especificação da condição de contorno é mais problemática. Enquanto, para esses casos, a condição na entrada do escoamento no domínio computacional deve idealmente consistir de um sinal de velocidade transiente e turbulento, representativo da turbulência na seção de entrada, por via de regra tem-se conhecimento apenas de quantidades estatísticas do escoamento, tais como o fluxo mássico médio ou a velocidade média e o perfil de energia cinética turbulenta. Adicionalmente, como a simulação de grandes escalas (e, mais ainda, a simulação numérica direta) exige um nível de discretização muito fino, como forma de reduzir o custo computacional de simulações de escoamentos em desenvolvimento é desejável que as fronteiras do domínio estejam posicionadas o mais próximo possível da região de interesse. Isso exige que o comprimento da região em que o escoamento turbulento gerado artificialmente na seção de entrada do domínio se desenvolve até atingir um comportamento fisicamente mais coerente seja tão curto quanto possível.

Diversos métodos para especificação de flutuações turbulentas como condição de contorno estão disponíveis na literatura. Dentre esses, os mais precisos utilizam simulações prévias com o objetivo de fornecer à simulação principal condições de contorno apropriadas; flutuações instantâneas de velocidade em um plano fixado a certa distância da entrada do domínio da simulação prévia são extraídas e prescritas na seção de entrada da simulação principal a cada passo de tempo. Exemplos dessa classe de métodos podem ser encontrados em Friedrich e Arnal, 1990,

Kaltenbach et al., 1999, Lund et al., 1998, e Aider e Danet, 2006, entre outros. Entretanto, por necessitarem de uma simulação preliminar, esses métodos apresentam maior custo computacional, além de estarem restritos a escoamentos simples e de sua generalização para geometrias arbitrárias de seção de entrada ser difícil [Jarrin, 2008]. Outra classe de métodos envolve a sintetização de turbulência usando algum processo estocástico, empregando geradores de números aleatórios para construir um sinal de velocidade que se assemelha à turbulência. Esses métodos podem trabalhar tanto no espaço físico (como, por exemplo, Schlüter et al., 2004, e Klein et al., 2003) como no espaço de Fourier (Kraichnan, 1970, Lee et al., 1992, entre outros).

O método utilizado neste trabalho para a imposição da condição de contorno de velocidade é o método dos vórtices sintéticos (SEM, do inglês *Synthetic Eddy Method*), implementado como padrão no algoritmo do FDS. Esse é um método sintético que trabalha no espaço físico, desenvolvido por Jarrin, 2008, e baseado na visão clássica da turbulência como uma superposição de estruturas coerentes de larga escala, que carregam a maior parte das tensões de Reynolds. A ideia do SEM é construir um sinal de velocidade sintético que possa ser escrito como uma soma de um número finito de vórtices com intensidades e posições aleatórias. Os vórtices são tratados como perturbações de velocidade sobre uma região esférica do espaço com diâmetro (escala de comprimento do vórtice) selecionado de uma distribuição aleatória uniforme. Eles são gerados na fronteira da entrada do domínio de cálculo e transportados com o escoamento principal por uma pequena distância, equivalente à escala máxima de comprimento dos vórtices, sendo então reciclados na seção de entrada em uma nova posição e novo tamanho, definidos de maneira aleatória [McGrattan et al., 2015a].

Em sua tese, Jarrin, 2008, detalha o método e sua validação para diversos casos. O SEM garante que o sinal gerado seja o de um processo ergódico aleatório – ou seja, que a média temporal do sinal calculada em certo intervalo de tempo convirja para o valor médio de um conjunto de tomadas de dados desse mesmo sinal conforme o intervalo tende ao infinito [Lesieur, 2008; Bendat e Piersol, 2010]. Além disso, o método é capaz de reproduzir estatísticas da turbulência (isto é, médias, correlações cruzadas e momentos centrais) de forma coerente com a teoria e, quando comparado a outros métodos de geração sintética de turbulência, observa-se um desempenho superior mesmo em problemas com escoamentos turbulentos mais complicados, envolvendo separação e recolamento [Jarrin, 2008].

O objetivo principal do SEM é a imposição de condições de contorno turbulentas a partir de dados médios do escoamento, obtidos idealmente de uma simulação RANS prévia [Jarrin, 2008]. Os parâmetros necessários para a geração sintética da turbulência nesse método são a velocidade média do escoamento, o número de vórtices, a escala de comprimento dos vórtices e o tensor de tensões de Reynolds, podendo este último ser substituído pela raiz do valor quadrático médio (RMS, do inglês *root mean square*) da flutuação de velocidade, u'_{RMS} , definida como:

$$u'_{RMS} = \sqrt{u'_i u'_i} \quad (2.19)$$

onde o símbolo ' indica uma flutuação em relação à média temporal da variável.

A determinação da velocidade média do escoamento e da flutuação de velocidade RMS é trivial, a primeira estando ligada ao escoamento principal (e ao número de Reynolds), e a segunda, à intensidade de turbulência IT , que é definida como a razão entre u'_{RMS} e a velocidade média do escoamento. Por outro lado, a escala de comprimento dos vórtices, L_e , é obtida da relação:

$$L_e = \max \left[\min \left(\frac{k^{3/2}}{\epsilon}, C_\kappa L \right), \max(\delta x, \delta y, \delta z) \right] \quad (2.20)$$

onde k é a energia cinética turbulenta por unidade de massa, ϵ é a taxa de dissipação viscosa, L é um comprimento característico associado ao escoamento (nesta dissertação, cujo problema consiste no escoamento em um duto de seção retangular, escolhe-se o diâmetro hidráulico D_h como sendo o comprimento característico), e C_κ é a constante de von Karman, igual a 0,41.

2.3.5 Medida de resolução da turbulência (MTR)

O tamanho característico do filtro utilizado na filtragem das equações fundamentais, Δ , é um parâmetro significativo em LES, pois é o responsável pela definição de quais escalas (ou, de forma equivalente, quais frequências) de vórtices da turbulência são resolvidos diretamente da solução do sistema de equações e quais escalas devem ser modeladas [Pope, 2004]. Como, neste trabalho, Δ é uma função do nível de discretização espacial, sendo cada vez menor quanto menores forem os volumes finitos empregados, a malha espacial está relacionada ao quanto das flutuações causadas pela turbulência são efetivamente resolvidas no cálculo numérico.

Uma medida M da quantidade de flutuações que é de fato resolvida pela malha numérica foi introduzida por Pope, 2004, sendo definida como a razão entre a energia cinética turbulenta residual – ou seja, a parcela de energia cinética dos vórtices com escala menor que Δ – e a energia cinética do escoamento resolvido. Na metodologia adotada no presente trabalho, a determinação direta de M não é possível, então esse critério é aproximado através da média temporal de uma outra grandeza, denominada medida da resolução da turbulência (MTR, do inglês *Measure of Turbulence Resolution*) [McGrattan et al., 2015a], que é definida como

$$MTR = \frac{k^{sgs}}{k^{res} + k^{sgs}} \quad (2.21)$$

onde k^{res} e k^{sgs} são, respectivamente, a parcela resolvida da energia cinética do escoamento por unidade de massa, dada na Eq. (2.22), e a parcela da energia cinética do escoamento (também por unidade de massa) na escala submalha, Eq. (2.23). Enquanto o cálculo de k^{res} é trivial, a determinação de k^{sgs} não é fácil através da modelagem adotada. Para isso, o código numérico

empregado nesta dissertação utiliza o modelo de viscosidade turbulenta de Deardorff, 1980, estimando a energia cinética submalha como $(\mu_T/(\rho C_v \Delta))^2$, onde $C_v = 0,1$ é uma constante do modelo [McGrattan et al., 2015a].

$$k^{res} = \frac{1}{2} \tilde{u}_i \tilde{u}_i \quad (2.22)$$

$$k^{sgs} = \frac{1}{2} (u_i - \tilde{u}_i)(u_i - \tilde{u}_i) \quad (2.23)$$

Na simulação de grandes escalas, o critério M de Pope é útil para verificar se o nível de discretização espacial escolhido é apropriado para a solução de determinado problema, e a medida de resolução da turbulência, sendo usada como substituta para este critério, tem sido aplicada com essa finalidade em estudos similares ao apresentado nesta dissertação (por exemplo, McDermott, 2011; Mahmood e Radespiel, 2013; Velasco, 2014). O valor do parâmetro MTR , assim como o critério M , varia entre 0 e 1, com 0 indicando à resolução integral das escalas da turbulência (caso encontrado em DNS), e 1, à sua modelagem total (RANS).

Em geral, na simulação de grandes escalas são recomendados valores máximos de M de 0,2 – ou seja, a solução de pelo menos 80 % da energia cinética turbulenta do escoamento. Como mostrado em McDermott et al., 2010, mantendo-se valores médios de MTR próximos de 0,2 são encontrados resultados bastante satisfatórios de velocidades e concentrações químicas médias na análise de chamas de empuxo.

2.4 A radiação térmica em meios participantes

O mecanismo da transferência de calor por radiação térmica pode ser compreendido como o transporte de energia por ondas eletromagnéticas emitidas por uma superfície sólida, um líquido ou um gás. Outra interpretação da radiação térmica é através da mecânica quântica, utilizando o conceito de fótons; nesta visão, a emissão de radiação de uma superfície é caracterizada pela liberação de fótons, e a absorção, pela sua captura [Siegel e Howell, 2002; Bergman et al., 2011].

Devido à forma como a emissão de radiação se comporta com variações de temperatura, a radiação térmica torna-se importante em muitas aplicações. Para condução e convecção do calor, a energia transferida entre dois corpos depende da diferença entre suas temperaturas elevada aproximadamente à primeira potência – essa potência pode ser um pouco mais elevada que a unidade em convecção livre ou quando são consideradas propriedades térmicas variáveis, mas o expoente é geralmente menor que dois. No entanto, a transferência de calor por radiação entre dois pontos depende da diferença entre suas temperaturas absolutas, cada uma elevada à quarta potência. Portanto, dessa diferença básica entre radiação e convecção ou condução, tem-se que o

papel da radiação na transferência de calor é muito mais significativo em problemas envolvendo altas temperaturas – por exemplo, em fornos, câmaras de combustão, chamas e em canais de exaustão de gases quentes [Bergman et al., 2011].

Outra importante diferença entre a radiação e a convecção ou condução é que estas últimas necessitam da presença de um meio material para a transferência de energia ocorrer, enquanto a radiação térmica pode se propagar mesmo no vácuo. Além disso, quando a transferência de calor acontece na presença de um gás, este pode absorver, emitir ou espalhar a radiação, sendo chamado então de meio participante. Exemplos de espécies participantes são gases não monoatômicos, como o monóxido e o dióxido de carbono, hidrocarbonetos como o metano, e o vapor de água [Modest, 2003]. Todos estes podem ser encontrados em aplicações a altas temperaturas, como as citadas no parágrafo anterior, de modo que uma compreensão do processo de transferência de calor por radiação na presença de um meio participante é de grande importância prática.

O estudo da radiação em meios participantes é bastante desafiador devido a duas características particulares do problema. A primeira é que a absorção, a emissão e o espalhamento podem ocorrer em qualquer ponto do meio, de modo que uma solução completa do problema de troca térmica exige o conhecimento da intensidade de radiação, da temperatura e das propriedades físicas do meio em cada ponto do espaço, em um domínio que muitas vezes é tridimensional e extenso. A segunda dificuldade é que o comprimento de onda (ou, de forma equivalente, o número de onda) em que a radiação está se propagando afeta significativamente a maneira como esta é emitida, absorvida ou espalhada pelo gás. A maioria das simplificações introduzidas para a solução de problemas de radiação em meios participantes estão direcionadas para a redução de uma ou de ambas dessas complexidades [Siegel e Howell, 2002].

Nesta dissertação, a parte espacial do problema é resolvida numericamente através do método dos volumes finitos, que é discutido no Capítulo 3. A dependência espectral do problema, por sua vez, é tratada através do modelo do gás cinza (GG, do inglês *Gray Gas*) e do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG, do inglês *Weighted-Sum-of-Gray-Gases*), que são comparados como forma de avaliar os efeitos do TRI sobre soluções que consideram e desconsideram a variação do coeficiente de absorção com o número de onda. Esses dois modelos são detalhados na Seção 2.5, enquanto uma discussão maior sobre o seu emprego no contexto do TRI é feita na Seção 2.6. Primeiramente, entretanto, alguns conceitos fundamentais sobre radiação térmica em meios participantes são introduzidos, assim como a equação de transferência radiativa.

2.4.1 A intensidade de radiação

Devido a certas propriedades suas que são invariantes, a intensidade de radiação é uma grandeza conveniente para o estudo da transferência de calor radiativa em meios participantes. Dois tipos de intensidade podem ser definidos: a intensidade de radiação espectral, I_η , que se refere à radiação em um intervalo $d\eta$ em torno de um único comprimento de onda; e a in-

tensidade de radiação total, I , que corresponde à radiação que compreende todos os números de onda e doravante será chamada apenas de intensidade [Siegel e Howell, 2002]. A relação entre a intensidade e a intensidade espectral é dada na Eq. (2.24). Nesta dissertação, o índice η denota uma dependência espectral da variável e esta dependência é tratada como função do número de onda, representado pela mesma letra grega e definido como sendo o inverso do comprimento de onda da radiação.

$$I = \int_0^{+\infty} I_\eta d\eta \quad (2.24)$$

Em um meio participante, a intensidade de radiação é dada em termos de uma área infinitesimal local dA dentro do meio. Ou seja, a intensidade é definida como a energia radiativa passando por uma área por unidade de tempo, por unidade de área normal à direção de propagação da radiação, e por unidade de ângulo sólido centrado na direção na qual a radiação se propaga. A intensidade espectral, por sua vez, é expressa da mesma forma, porém incorporando também a variável espectral [Siegel e Howell, 2002].

A partir desses conceitos, chega-se ao resultado que, em um meio que não interage com a radiação térmica, a intensidade radiativa em certa direção é constante ao longo de sua trajetória (uma dedução detalhada pode ser encontrada em Modest, 2003). Essa propriedade torna a intensidade de radiação uma grandeza adequada para a descrição da absorção, emissão e espalhamento de energia em um meio participante, uma vez que qualquer mudança encontrada no seu valor ao longo de certo caminho deve necessariamente ser atribuída a um desses fenômenos.

2.4.2 O corpo negro

O corpo negro é uma idealização que serve de referência para a comparação com superfícies reais e para a definição de propriedades radiativas destas. Um corpo negro permite que toda a radiação incidente o penetre (ou seja, nenhuma energia é refletida) e seja absorvida internamente em sua totalidade, não havendo transmissão de energia através dele; isso é válido para todos os números de onda e todos os ângulos de incidência [Siegel e Howell, 2002].

Dessa propriedade, resultam duas características importantes do corpo negro. A primeira é que, para dada temperatura e determinado número de onda, o corpo negro emite o máximo de radiação possível. A segunda característica é que a radiação emitida pelo corpo negro depende, justamente, apenas da temperatura e do número de onda – isto é, não é função da direção.

A intensidade de radiação espectral do corpo negro, $I_{b\eta}$, é dada pela distribuição espectral de Planck [Modest, 2003]:

$$I_{b\eta}(T, \eta) = \frac{2h_P c_0^2 \eta^3}{n_r^2 (e^{h_P c_0 \eta / n_r k_B T} - 1)} \quad (2.25)$$

onde $h_P = 6,626 \times 10^{-34}$ Js e $k_B = 1,3807 \times 10^{-23}$ J/K são as constantes de Planck e de Boltzmann, respectivamente; $c_0 = 2,998 \times 10^8$ m/s é a velocidade da luz no vácuo; e n_r é o índice de refração. Para um meio no qual a luz se propaga a uma velocidade próxima à velocidade da luz no vácuo, como é o caso da grande maioria de aplicações de engenharia, o índice de refração é aproximadamente igual à unidade [Siegel e Howell, 2002].

A intensidade radiativa total do corpo negro, I_b , pode ser obtida da integração da Eq. (2.25) sobre todos os números de onda,

$$I_b(T) = \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (2.26)$$

onde $\sigma = 5,6704 \times 10^{-8}$ W/(m²K⁴) é a constante de Stefan-Boltzmann.

2.4.3 A equação da transferência radiativa (RTE)

A variação da intensidade de radiação espectral ao longo de certo caminho s dentro do meio pode ser calculada através da equação de transferência radiativa. Essa equação é obtida de um balanço de energia, somando as contribuições da absorção, da emissão e do espalhamento. Para um meio homogêneo, estacionário (comparado à velocidade da luz) e não polarizante, com índice de refração constante – isto é, no qual as ondas eletromagnéticas se propagam em linhas retas – e que esteja em equilíbrio termodinâmico local, a RTE é escrita como [Viskanta e Mengüç, 1987; Modest, 2003]:

$$\begin{aligned} \frac{dI_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{s})}{ds} = & \kappa_\eta(\mathbf{x}) I_{b\eta}(\mathbf{x}) - [\kappa_\eta(\mathbf{x}) + \sigma_{s\eta}(\mathbf{x})] I_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \\ & + \frac{\sigma_{s\eta}(\mathbf{x})}{4\pi} \int_{4\pi} I_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{s}_{in}) \Psi(\mathbf{s}, \mathbf{s}_{in}) d\Omega_{in} \end{aligned} \quad (2.27)$$

onde $I_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ é a intensidade de radiação espectral na posição \mathbf{x} e na direção \mathbf{s} ; $I_{b\eta}(\mathbf{x})$ é a intensidade espectral de corpo negro na temperatura da posição \mathbf{x} ; $\kappa_\eta(\mathbf{x})$ e $\sigma_{s\eta}(\mathbf{x})$ são os coeficientes de absorção e espalhamento espectrais, respectivamente, avaliados nas propriedades da posição \mathbf{x} ; e $\Psi(\mathbf{s}, \mathbf{s}_{in})$ é a função de fase do espalhamento. A quantidade $\Psi(\mathbf{s}, \mathbf{s}_{in})/4\pi$ representa a probabilidade da radiação propagando-se na direção \mathbf{s}_{in} , e confinada dentro do ângulo sólido infinitesimal $d\Omega_{in}$, seja espalhada na direção \mathbf{s} , contida dentro do ângulo sólido $d\Omega$ [Siegel e Howell, 2002].

Nesta dissertação, o espalhamento é negligenciado. Essa é uma prática comum em estudos tratando da interação turbulência-radiação, não pelo fato de o TRI não ser importante em meios que espalham radiação, mas porque o espalhamento aumenta de forma significativa a complexidade do problema [Coelho, 2007]. A RTE para um meio participante que absorve e

emite radiação, mas não espalha, é dada por:

$$\frac{dI_\eta(\mathbf{s})}{ds} = \kappa_\eta I_{b\eta} - \kappa_\eta I_\eta(\mathbf{s}) \quad (2.28)$$

onde a dependência da coordenada espacial foi omitida por simplicidade.

A RTE é uma equação diferencial de primeira ordem com respeito à intensidade espectral (para uma dada direção fixa \mathbf{s}). Portanto, para a sua solução, é necessário o conhecimento da intensidade espectral em um ponto do espaço, na direção \mathbf{s} . Em geral, o ponto onde a intensidade pode ser especificada de forma independente é em uma das superfícies da cavidade que contém o meio participante. Para uma superfície cinza, que emite e reflete radiação de forma difusa, a condição de contorno para a intensidade de radiação espectral é dada por [Modest, 2003]:

$$I_{\eta,w}(\mathbf{s}) = \varepsilon_w I_{b\eta,w} + \frac{1 - \varepsilon_w}{\pi} \int_{\mathbf{n}_w \cdot \mathbf{s}_{in} < 0} |\mathbf{n}_w \cdot \mathbf{s}_{in}| I_\eta(\mathbf{x}_w, \mathbf{s}_{in}) d\Omega_{in} \quad (2.29)$$

onde $I_{\eta,w}(\mathbf{s})$ é a intensidade espectral que deixa a superfície na direção \mathbf{s} , $I_{b\eta,w}$ é a intensidade espectral de corpo negro na temperatura da superfície, ε_w é a emissividade da superfície, \mathbf{n}_w é o vetor unitário normal à superfície, e \mathbf{s}_{in} é a direção da intensidade incidente sobre a superfície, associada ao ângulo sólido $d\Omega_{in}$.

2.4.4 O termo fonte radiativo e o fluxo de calor radiativo nas paredes

A contribuição da radiação térmica para a equação da energia, presente nas Eqs. (2.4) e (2.6) como o símbolo S_r , é denominada termo fonte volumétrico de transferência de calor por radiação, ou simplesmente termo fonte radiativo. Da mesma forma que a contribuição da condução térmica para a equação da energia é dada pelo valor negativo do vetor fluxo de calor por condução – o termo $\partial(\lambda \partial T / \partial x_i) / \partial x_i$ nas Eqs. (2.4) e (2.6) –, S_r é calculado como o valor negativo da divergência do vetor fluxo de calor por radiação, \mathbf{q}_r'' [Siegel e Howell, 2002]:

$$S_r = -\nabla \cdot \mathbf{q}_r'' \quad (2.30)$$

O divergente do fluxo de calor radiativo é obtido de um balanço da energia radiativa que é depositada em ou retirada de cada elemento de volume. Ou seja, [Modest, 2003]

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_r'' = \int_0^\infty \kappa_\eta (4\pi I_{b\eta} - U_\eta) d\eta \quad (2.31)$$

onde U_η é a intensidade integrada sobre todas as direções, também chamada de radiação espectral

incidente, uma vez que é a intensidade espectral chegando a determinado ponto de todas as direções possíveis. A radiação espectral incidente dada por:

$$U_\eta = \int_{4\pi} I_\eta d\Omega \quad (2.32)$$

De forma similar, o fluxo de calor radiativo em uma superfície é determinado por um balanço da energia radiativa espectral incidente e da energia espectral emitida integrada sobre todos os comprimentos de onda. Para uma superfície cinza, isso resulta em:

$$q''_{r,w} = \varepsilon_w \int_0^\infty \left[\int_{\mathbf{n}_w \cdot \mathbf{s}_{in} < 0} |\mathbf{n}_w \cdot \mathbf{s}_{in}| I_\eta(\mathbf{x}_w, \mathbf{s}_{in}) d\Omega_{in} - \pi I_{b\eta,w} \right] d\eta \quad (2.33)$$

2.5 Modelos espectrais

A solução da RTE, independentemente da consideração ou não do espalhamento, exige uma integração espectral para a obtenção da intensidade de radiação total. Para meios constituídos de dióxido de carbono ou vapor de água, como nos casos estudados nesta dissertação, essa não é uma tarefa fácil, visto que o coeficiente de absorção dessas espécies tem um comportamento altamente irregular em relação ao número de onda, como se pode observar na Figura 2.1.

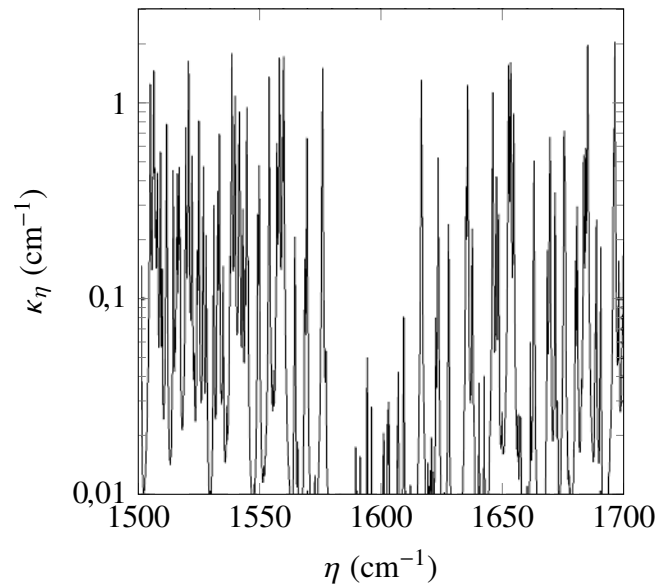


Figura 2.1 – Coeficiente de absorção de uma mistura de ar (gás inerte) e 20 % em volume de vapor de água a temperatura de 400 K e pressão total de 1 atm na faixa espectral $1500 \text{ cm}^{-1} < \eta < 1700 \text{ cm}^{-1}$ (adaptado de Silva, 2015).

Teoricamente, caso informações detalhadas o suficiente sobre o coeficiente de absorção espectral estejam disponíveis – retiradas, por exemplo, de bancos de dados espectrais como o HITRAN (do inglês *high-resolution transmission molecular absorption database*) [Rothman et al., 2013] e o HITEMP [Rothman et al., 2010] (do inglês *high-temperature molecular spectroscopic database*) –, a solução da RTE (e, conseqüentemente, a determinação dos fluxos de calor e do termo fonte radiativo) pode ser feita de forma acurada. Tal abordagem é chamada de solução linha-por-linha (LBL, do inglês *Line-By-Line*) [Taine, 1983], em referência ao fato de a distribuição de κ_η se dar como um conjunto de linhas verticais no espectro, que são todas individualmente consideradas na integração espectral. Porém, na prática, a rápida variação do coeficiente de absorção do meio com o comprimento de onda exige um número muito grande (da ordem de milhões) de avaliações no espectro para a aplicação do método LBL, o que o torna impraticável para a maioria das aplicações [Modest, 2003].

É da complexidade e da alta demanda computacional exigida para o tratamento da radiação em meios participantes (especialmente em meios não cinzas) que surge a demanda por modelos espectrais mais simples, os quais, em geral, envolvem uma série de aproximações e são válidos em um número limitado de situações. Os diferentes modelos espectrais podem ser agrupados em modelos de bandas, em que o espectro é dividido em intervalos nos quais certas propriedades radiativas podem ser consideradas constantes, e modelos globais, em que as propriedades radiativas são aproximadas considerando a totalidade do espectro. Entre os modelos de banda, pode-se citar o modelo de banda estreita estatístico (SNB, do inglês *Statistical Narrow Band*) [Goody, 1952], o modelo de banda larga exponencial (EWB, do inglês *Exponential Wide-Band*) [Edwards e Balakrishnan, 1973] e o modelo k -correlacionado de banda estreita estatístico (SNBCK, do inglês *Statistical Narrow Band based Correlated-k*) [Liu e Smallwood, 2004]. Entre os modelos globais, tem-se, por exemplo, o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG) [Hottel e Sarofim, 1967], o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza baseada em linhas espectrais (SLW, do inglês *Spectral Line-based WSGG*) [Denison e Webb, 1993] e o modelo de distribuição k -correlacionado para espectro completo (FSCK, do inglês *Full-Spectrum Correlated-k*) [Modest e Zhang, 2002].

Nesta dissertação, o modelo WSGG é empregado para a avaliação das propriedades radiativas do meio, e é discutido em mais detalhes na Seção 2.5.2. Para fins de comparação dos resultados no contexto do TRI, o modelo do gás cinza também é utilizado. Este modelo assume que as propriedades radiativas são invariantes com o número de onda e , por ser mais simples, é apresentado primeiro, na subseção seguinte.

2.5.1 O modelo do gás cinza (GG)

No modelo do gás cinza, assume-se que as variações espectrais das propriedades radiativas do meio são negligenciáveis para todo o espectro de número de onda, ou seja, $\kappa_\eta = \kappa$ [Siegel e Howell, 2002]. Assim, a equação da transferência radiativa e a expressão para o termo fonte

radiativo podem ambas serem escritas diretamente nas suas formas espectralmente integradas, ou seja,

$$\frac{dI(\mathbf{s})}{ds} = \kappa I_b - \kappa I(\mathbf{s}) \quad (2.34)$$

$$S_r = \kappa (U - 4\pi I_b) \quad (2.35)$$

onde U é a radiação incidente total, calculada como:

$$U = \int_{4\pi} I d\Omega \quad (2.36)$$

O coeficiente de absorção pode ter um valor constante ou ser uma função da temperatura e da concentração química do meio. No presente trabalho, ambas as abordagens são consideradas.

Para o cálculo de κ como uma função da temperatura (a dependência do coeficiente de absorção com a composição do meio não é considerada, uma vez que, em todos os casos simulados nesta dissertação, este é homogêneo e constituído de uma única espécie), emprega-se o modelo apresentado por Cassol et al., 2015. Nesse modelo, o coeficiente de absorção de determinada espécie χ é dado como uma função polinomial:

$$\kappa_\chi = p_\chi \sum_{i=0}^5 c_{GG,i} T^i \quad (2.37)$$

onde p_χ é a pressão parcial da espécie χ (nos casos considerados neste trabalho, $p_\chi = 1$) e $c_{GG,i}$ são os coeficientes do modelo, obtidos de ajustes de curva a partir do banco de dados HITEMP2010 [Cassol et al., 2015]. Estes ajustes são baseados em uma média de Planck sobre todo o espectro, definida na Eq. (2.38), e os valores dos coeficientes $c_{GG,i}$, para o dióxido de carbono e para o vapor de água, são dados na Tabela 2.1.

$$\kappa = \frac{\int_{\eta} \kappa_{\eta} I_{b\eta} d\eta}{\int_{\eta} \kappa_{\eta} d\eta} \quad (2.38)$$

Dentre os modelos espectrais disponíveis na literatura, o modelo do gás cinza é o de implementação mais simples. Para uma espécie participante como o CO_2 e o H_2O , em que o coeficiente de absorção tem um comportamento espectral altamente irregular, conforme exemplificado na Figura 2.1, a suposição de que essa propriedade é independente do número de onda é no mínimo controversa. Apesar disso, grande parte dos estudos sobre radiação em meios

Tabela 2.1 – Coeficientes polinomiais para o cálculo do coeficiente de absorção no modelo do gás cinza de Cassol et al., 2015.

	$\chi = \text{CO}_2$	$\chi = \text{H}_2\text{O}$
$c_{GG,0}$ ($\text{m}^{-1} \text{atm}^{-1}$)	$-6,4750 \times 10^1$	$7,5702 \times 10^1$
$c_{GG,1}$ ($\text{m}^{-1} \text{atm}^{-1} \text{K}^{-1}$)	$4,2895 \times 10^{-1}$	$-1,9716 \times 10^{-1}$
$c_{GG,2}$ ($\text{m}^{-1} \text{atm}^{-1} \text{K}^{-2}$)	$-6,6089 \times 10^{-4}$	$2,1998 \times 10^{-4}$
$c_{GG,3}$ ($\text{m}^{-1} \text{atm}^{-1} \text{K}^{-3}$)	$4,4190 \times 10^{-7}$	$-1,2429 \times 10^{-9}$
$c_{GG,4}$ ($\text{m}^{-1} \text{atm}^{-1} \text{K}^{-4}$)	$-1,3796 \times 10^{-10}$	$3,5385 \times 10^{-11}$
$c_{GG,5}$ ($\text{m}^{-1} \text{atm}^{-1} \text{K}^{-5}$)	$1,6484 \times 10^{-14}$	$-3,9662 \times 10^{-15}$

participantes faz uso desse modelo, devido principalmente à sua simplicidade e ao baixo custo computacional associado a ele, que facilitam a solução da RTE – uma equação cuja solução, mesmo assumindo o meio como cinza, é complexa [Modest, 2003].

No contexto do TRI, aplicações do modelo GG podem ser encontradas nos trabalhos de Germano, 1978; Hartick et al., 1996; Snegirev, 2004; Wu et al., 2005; Wang e Modest, 2007; Deshmukh et al., 2007; Deshmukh et al., 2008; Gupta et al., 2009; Centeno, 2014; Santos et al., 2014; e Velasco, 2014.

2.5.2 O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG)

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza é um modelo global em que o espectro de radiação é representado por um conjunto de gases cinza, com coeficientes de absorção uniformes, e por janelas transparentes [Modest, 1991]. Como ilustração, a Figura 2.2 mostra uma representação esquemática do coeficiente de absorção para um meio participante modelado por $N_{G,\chi}$ gases cinza, cada um com coeficiente de absorção $\kappa_{\chi,g}$. O índice χ representa um componente genérico do meio participante ou o meio participante como um todo (neste último caso, adota-se $\chi = m$). A simplicidade do modelo WSGG fica evidente ao comparar-se o esquema na Figura 2.2 com o espectro mostrado na Figura 2.1.

O modelo WSGG assume que cada gás cinza g cobre uma porção fixa, porém não necessariamente contígua, do espectro, indicada na Figura 2.2 como $\Delta\eta_{\chi,g}$. Outra hipótese fundamental dentro do modelo é que, para cada gás cinza, a razão entre o coeficiente de absorção $\kappa_{\chi,g}$ de cada espécie e sua pressão parcial p_χ – denominada coeficiente de absorção baseado na pressão, $\kappa_{p\chi,\eta}$, definido na Eq. (2.39) – é independente da temperatura e da pressão parcial. Essas considerações são formas mais rigorosas da aproximação de escala, na qual a dependência do coeficiente de absorção com o número de onda e o estado termodinâmico (temperatura e concentração de espécies químicas) são desacoplados [Denison e Webb, 1995;

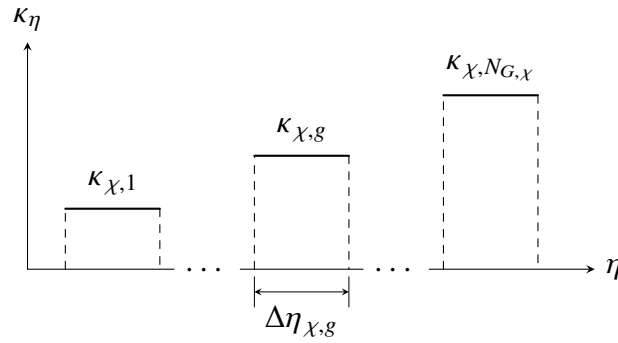


Figura 2.2 – Representação do coeficiente de absorção no modelo WSGG com $N_{G,\chi}$ gases cinza [adaptado de Dorigon et al., 2013].

Dorigon et al., 2013].

$$\kappa_{p\chi,\eta} = \frac{\kappa_{\chi,\eta}}{p_\chi} \quad (2.39)$$

Similarmente ao procedimento adotado para a obtenção do polinômio para o cálculo do coeficiente de absorção no modelo GG, discutido na Seção 2.5.1, os parâmetros dos gases cinza no modelo WSGG são também determinados a partir de ajustes de curva. No entanto, nesse caso os ajustes são, em geral, feitos em termos da emitância total.

A emitância total ε é definida como a porção da radiação total emitida sobre um caminho s que não é atenuada por absorção dividida pela máxima emissão possível [Modest, 2003]. Para uma espécie arbitrária χ , sua expressão é dada como:

$$\varepsilon_\chi = \frac{\int_\eta I_{b\eta} [1 - \exp(-\kappa_{p\chi,\eta} p_\chi s)]}{\sigma T^4 / \pi} \quad (2.40)$$

Aplicando o modelo WSGG à integração da Eq. (2.40) resulta em:

$$\varepsilon_\chi = \sum_{g=1}^{N_{G,\chi}} a_{\chi,g}(T) [1 - \exp(-\kappa_{p\chi,g} p_\chi s)] \quad (2.41)$$

onde $a_{\chi,g}(T)$ e $\kappa_{p\chi,g}$ são, respectivamente, o coeficiente de temperatura e o coeficiente de absorção baseado na pressão para o gás cinza g (e para a espécie χ). Esses coeficientes podem ser determinados a partir de comparações da Eq. (2.41) com resultados encontrados da solução direta da Eq. (2.40) usando o método linha-por-linha. Fazendo isso para diferentes valores de temperatura e de $p_\chi s$, o coeficiente de absorção baseado na pressão $\kappa_{p\chi,g}$ e o coeficiente de temperatura $a_{\chi,g}$ para cada gás cinza podem ser obtidos através de ajustes de curva.

Fisicamente, $a_{\chi,g}$ representa a fração de energia de corpo negro correspondente às regiões do espectro em que o coeficiente de absorção baseado na pressão do gás cinza g é $\kappa_{p\chi,g}$. Por essa razão, o coeficiente de temperatura está presente nas equações da transferência radiativa, do termo fonte radiativo e do fluxo de calor radiativo superficial (apresentadas a seguir) como um fator de ponderação associado ao termo de emissão de energia. Outra interpretação de $\kappa_{p\chi,g}$ e $a_{\chi,g}$, advinda da discussão feita no parágrafo anterior, é que esse parâmetros são simplesmente os valores que fornecem o melhor ajuste para a Eq. (2.40) [Silva, 2015].

Smith et al., 1982, propuseram uma função polinomial para a representação do coeficiente de temperatura,

$$a_{\chi,g}(T) = \sum_{k=0}^{N_{K,\chi}} b_{\chi,g,k} T^k \quad (2.42)$$

em que $b_{\chi,g,k}$ são os coeficientes polinomiais associados a cada gás cinza e a cada espécie, e $N_{K,\chi}$ é o grau do polinômio que caracteriza $a_{\chi,g}$.

Além dos gases cinza, o modelo WSGG assume a existência de janelas transparentes para as quais o coeficiente de absorção é nulo – ou seja, $\kappa_{\chi,0} = 0$, onde o índice $g = 0$ é utilizado para denotar a janela transparente. Como o somatório dos coeficientes de temperatura sobre todos os gases que compõem o modelo deve ser igual à unidade para cumprir a exigência de conservação de energia, o coeficiente de temperatura da janela transparente, $a_{\chi,0}$, pode ser facilmente obtido, uma vez conhecidos os coeficientes de temperatura de todos os gases cinza, através da equação:

$$a_{\chi,0}(T) = 1 - \sum_{g=1}^{N_{G,\chi}} a_{\chi,g}(T) \quad (2.43)$$

Nesta dissertação, considera-se o meio participante como homogêneo e constituído somente de dióxido de carbono ou somente de vapor de água. Os coeficientes adotados para o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza são aqueles gerados por Cassol et al., 2014, para essas espécies, mostrados nas Tabelas 2.2 e 2.3. Nesse conjunto de correlações, o modelo WSGG é composto de quatro gases e o grau do polinômio que define o coeficiente de temperatura é também igual a quatro – isto é, $N_{G,\chi} = N_{K,\chi} = 4$, tanto para $\chi = \text{CO}_2$ como para $\chi = \text{H}_2\text{O}$.

A equação da transferência radiativa no modelo WSGG é obtida através da integração da equação original, Eq. (2.28), sobre o intervalo espectral $\Delta\eta_{m,g}$ (supondo que o coeficiente espectral do meio pode ser representado pelo esquema dado na Figura 2.2). Procedendo-se dessa maneira, tem-se a expressão para a RTE no modelo WSGG, para um gás cinza arbitrário g :

$$\frac{dI_{m,g}(\mathbf{x}, \mathbf{s})}{ds} = \kappa_{m,g}(\mathbf{x})a_{m,g}(\mathbf{x})I_b(\mathbf{x}) - \kappa_{m,g}(\mathbf{x})I_{m,g}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \quad (2.44)$$

Tabela 2.2 – Coeficientes do modelo WSGG com quatro gases cinza para o dióxido de carbono [Cassol et al., 2014].

Parâmetros	<i>g</i>			
	1	2	3	4
$\kappa_{p,g}$ (atm ⁻¹ m ⁻¹)	0,138	1,895	13,301	340,811
$b_{g,0}$	0,0999	0,009 42	0,145 11	-0,029 15
$b_{g,1}$ (K ⁻¹)	$64,41 \times 10^{-5}$	$10,36 \times 10^{-5}$	$-30,73 \times 10^{-5}$	$25,23 \times 10^{-5}$
$b_{g,2}$ (K ⁻²)	$-86,94 \times 10^{-8}$	$2,277 \times 10^{-8}$	$37,65 \times 10^{-8}$	$-26,10 \times 10^{-8}$
$b_{g,3}$ (K ⁻³)	$41,27 \times 10^{-11}$	$-2,134 \times 10^{-11}$	$-18,41 \times 10^{-11}$	$9,965 \times 10^{-11}$
$b_{g,4}$ (K ⁻⁴)	$-67,74 \times 10^{-15}$	$6,497 \times 10^{-15}$	$30,16 \times 10^{-15}$	$-13,26 \times 10^{-15}$

Tabela 2.3 – Coeficientes do modelo WSGG com quatro gases cinza para o vapor de água [Cassol et al., 2014].

Parâmetros	<i>g</i>			
	1	2	3	4
$\kappa_{p,g}$ (atm ⁻¹ m ⁻¹)	0,171	1,551	5,562	49,159
$b_{g,0}$	0,066 17	0,110 45	-0,049 15	0,236 75
$b_{g,1}$ (K ⁻¹)	$55,48 \times 10^{-5}$	$0,576 \times 10^{-5}$	$70,63 \times 10^{-5}$	$-18,91 \times 10^{-5}$
$b_{g,2}$ (K ⁻²)	$-48,41 \times 10^{-8}$	$24,00 \times 10^{-8}$	$-70,12 \times 10^{-8}$	$-0,907 \times 10^{-8}$
$b_{g,3}$ (K ⁻³)	$22,27 \times 10^{-11}$	$-17,01 \times 10^{-11}$	$26,07 \times 10^{-11}$	$4,082 \times 10^{-11}$
$b_{g,4}$ (K ⁻⁴)	$-40,17 \times 10^{-15}$	$30,96 \times 10^{-15}$	$-34,94 \times 10^{-15}$	$-9,778 \times 10^{-15}$

onde $\kappa_{m,g}(\mathbf{x})$ e $a_{m,g}(\mathbf{x})$ são, respectivamente, o coeficiente de absorção e o coeficiente de temperatura do gás g avaliados na temperatura e na concentração química da posição \mathbf{x} . É importante destacar que a Eq. (2.44) é válida também para as janelas transparentes, ou seja, com $g = 0$.

A Eq. (2.44) está sujeita à seguinte condição de contorno, para uma superfície difusa:

$$I_{m,g,w}(\mathbf{s}) = \varepsilon_w a_{m,g,w} I_{b,w} + \frac{1 - \varepsilon_w}{\pi} \int_{\mathbf{n}_w \cdot \mathbf{s}_{in} < 0} |\mathbf{n}_w \cdot \mathbf{s}_{in}| I_g(\mathbf{x}_w, \mathbf{s}_{in}) d\Omega_{in} \quad (2.45)$$

onde $a_{m,g,w}$ é o coeficiente de temperatura do gás g avaliado na temperatura da superfície.

Analogamente ao cálculo da intensidade de radiação total como uma integração da intensidade de radiação espectral sobre todos os números de onda, no modelo WSGG a intensidade total é obtida através de um somatório sobre todos os gases cinza e as janelas transparentes, como é expresso na Eq. (2.46). Nessa equação, assim como no restante deste texto, o índice m

é suprimido.

$$I = \sum_{g=0}^{N_G} I_g \quad (2.46)$$

Seguindo-se um procedimento similar ao realizado para a obtenção da Eq. (2.44), chega-se às expressões para o termo fonte radiativo e para o fluxo de calor radiativo superficial no modelo WSGG, mostradas respectivamente nas Eqs. (2.47) e (2.48).

$$S_r = \sum_{g=1}^{N_G} \kappa_g (U_g - 4\pi a_g I_b) \quad (2.47)$$

$$q''_{w,r} = \sum_{g=0}^{N_G} \varepsilon_w \left[\int_{\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}_{in} < 0} |\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}_{in}| I_g(\mathbf{x}_w, \mathbf{s}_{in}) d\Omega_{in} - \pi a_{g,w} I_{b,w} \right] \quad (2.48)$$

O modelo WSGG foi desenvolvido por Hottel e Sarofim, 1967, no contexto do método das zonas [Hottel e Cohen, 1958], e generalizado posteriormente por Modest, 1991, que demonstrou que o modelo pode ser utilizado em conjunto com qualquer método de solução da equação da transferência radiativa, desde que limitado a aplicações em cavidades com paredes negras e problemas desconsiderando o espalhamento. Essa restrição do modelo foi relaxada na nova análise feita por Modest e Zhang, 2000.

Quanto às correlações para a implementação do modelo, Smith et al., 1982, propuseram coeficientes para um conjunto restrito de misturas de espécies químicas e com razões constantes de pressões parciais (ou seja, de concentrações volumétricas). No entanto, as correlações apresentadas pelos autores têm como base dados espectrais desatualizados, de modo que resultados obtidos com elas podem diferir significativamente de soluções encontradas a partir de bancos espectrais modernos [Maurense et al., 2008; Mossi et al., 2012]. Correlações atualizadas foram geradas por Kangwanpongpan et al., 2012, e por Dorigon et al., 2013, para misturas de H₂O e CO₂ com razões de pressões parciais também constantes, e suas aplicações mostraram resultados bastante satisfatórios. Também podem ser encontradas na literatura formulações alternativas para o modelo WSGG, que permitem considerar variações nas concentrações volumétricas das espécies químicas, como nos trabalhos de Johansson et al., 2011, e Cassol et al., 2014.

Portanto, o estado atual de desenvolvimento do modelo WSGG permite sua aplicação em diversos casos, inclusive em problemas complexos – por exemplo, em cavidades com paredes cinzas, meios heterogêneos e não isotérmicos, e até mesmo considerando o espalhamento de radiação térmica. Apesar disso, a formulação do modelo é bastante simples e, uma vez estabelecidos os valores de seus coeficientes, a sua implementação em códigos numéricos

não exige o conhecimento de extensos bancos de dados espectrais. Adicionalmente, conforme muitos estudos anteriores demonstraram, o custo computacional associado ao WSGG é pequeno, especialmente quando comparado ao método LBL ou a outros modelos mais sofisticados. Esses fatores tornaram o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza muito popular ao longo dos anos, tanto em estudos fundamentais como em problemas práticos [Dorigon et al., 2013; Silva, 2015]. No estudo do TRI, esse modelo tem sido adotado com alguma frequência como forma de avaliar as propriedades radiativas do meio, como nos trabalhos Snegirev, 2004; Habibi et al., 2007; Krishnamoorthy, 2010; Centeno, 2014; e Centeno et al., 2014.

2.6 A interação turbulência-radiação (TRI)

Segundo Coelho, 2007, o fenômeno da interação turbulência-radiação caracteriza-se pelo erro encontrado na solução de problemas envolvendo radiação térmica e turbulência ao negligenciar-se as flutuações instantâneas das grandezas e propriedades para o cálculo da transferência radiativa. Ou seja, em certos casos, as médias temporais da intensidade de radiação e dos fluxos de calor podem ser muito diferentes dos valores calculados utilizando temperaturas e concentrações químicas médias. A magnitude dessa diferença depende do tipo de problema considerado, conforme discutido na Seção 1.1.

O TRI origina-se do acoplamento altamente não linear entre as flutuações (causadas pela turbulência) da intensidade de radiação e as flutuações da temperatura e da composição do meio. Matematicamente, por se manifestar de forma global sobre o problema de transferência de energia por radiação, o TRI pode ser explicado em termos de diferentes equações (por exemplo, a equação da transferência radiativa na forma diferencial ou na forma integrada, ou a expressão para o divergente do fluxo calor radiativo). Nesta seção, a RTE na forma diferencial é adotada com tal objetivo, e posteriormente são apresentadas também expressões para o fluxo de calor radiativo e o termo fonte radiativo. Uma explicação detalhada de como o TRI se manifesta nestas e em outras equações pode ser encontrada em Coelho, 2007.

2.6.1 A média temporal da RTE

Denotando por $\langle \phi \rangle$ qualquer média temporal sobre determinada variável ϕ , a média temporal da RTE, na forma espectralmente integrada e para um meio que não espalha radiação térmica, é dada por:

$$\frac{d\langle I \rangle}{ds} = \langle \kappa(Y, T) I_b(T) \rangle - \langle \kappa(Y, T) I \rangle \quad (2.49)$$

Nesta equação, deixa-se em evidência a dependência do coeficiente de absorção com a concentração das espécies químicas (representada pela letra Y) e com a temperatura, e a

dependência da intensidade de corpo negro com a temperatura. É importante ressaltar que, para a Eq. (2.49), Y e T são grandezas locais e instantâneas – isto é, possuem, pelo menos a princípio, valores que variam no espaço e no tempo.

A Eq. (2.49) representa o que é encontrado no pós-processamento de uma simulação numérica direta, em que é possível determinar valores instantâneos e locais de temperatura e concentrações químicas, a partir dos quais podem ser avaliados κ e I_b e, resolvendo-se a RTE instantânea, I , para então calcular a média temporal desta grandeza. Por outro lado, na modelagem clássica da turbulência, tem-se somente informações sobre os valores médios (no tempo) de Y e T . Pela natureza dessa metodologia, não é possível determinar valores instantâneos para essas grandezas, e, igualmente, não se pode encontrar valores instantâneos da intensidade de radiação. Ou seja, a equação da transferência radiativa na forma média é resolvida diretamente, porém utilizando-se os campos médios de temperatura e composição do meio:

$$\frac{d\langle I \rangle}{ds} = \kappa(\langle Y \rangle, \langle T \rangle) I_b(\langle T \rangle) - \kappa(\langle Y \rangle, \langle T \rangle) \langle I \rangle \quad (2.50)$$

Em contraste com a Eq. (2.49), do lado direito da Eq. (2.50) não existem as correlações cruzadas entre o coeficiente de absorção e a intensidade de corpo negro espectral e entre o coeficiente de absorção e a intensidade local, mas sim multiplicações simples entre estas mesmas grandezas. Além disso, tanto κ como I_b são avaliados empregando-se os valores locais médios das concentrações químicas e da temperatura. No entanto, do lado esquerdo da igualdade, o mesmo termo de derivada da intensidade de radiação média ao longo do caminho está presente em ambas as equações. Assim, como não se pode afirmar que os termos do lado direito das Eqs. (2.49) e (2.50) são iguais entre si ou que suas diferenças se cancelam (e, segundo diversos estudos disponíveis na literatura, as diferenças entre esses termos podem ser na realidade bastante pronunciadas), tem-se que as médias da intensidade de radiação espectral média obtidas pelas Eqs. (2.49) e (2.50) serão diferentes entre si. Este é o problema do TRI.

Como o cálculo da intensidade de radiação está ligado à equação da energia por meio do termo fonte radiativo, e a equação de energia, por sua vez, está acoplada às demais equações fundamentais, os efeitos do TRI tendem a ser globais. O resultado, em certos casos, conforme discutido na introdução deste trabalho, são grandes erros na predição de quantidades como temperaturas e taxas de transferência de calor.

Na dedução apresentada nesta seção, assume-se que, para um mesmo problema, os valores médios de temperatura e composição do meio nas Eqs. (2.49) e (2.50) são idênticos; esta é também uma suposição fundamental para a elaboração do fator de correção ϱ na Seção 5.4. De fato, o conceito de médias de Reynolds garante que tal identidade seja cumprida, desde que as médias $\langle T \rangle$ e $\langle Y \rangle$ sejam tomadas sobre a mesma série de dados e no mesmo intervalo de tempo para ambas as equações. Porém, na prática, o efeito das interações entre turbulência e radiação acumula-se sobre o transiente do problema ou da simulação numérica, de modo que,

em cada instante de tempo, esses campos, que são dependentes da transferência radiativa, são afetados pela consideração ou não do TRI. Portanto, após um período de tempo suficientemente longo, a desconsideração do fenômeno levará a temperaturas (e concentrações químicas) médias que podem ser bastante distintas das médias calculadas com os valores instantâneos obtidos considerando o TRI.

Neste trabalho, é adotada uma nomenclatura específica para diferenciar os resultados obtidos com a metodologia dada na Eq. (2.49) daqueles encontrados pelo método ilustrado na Eq. (2.50) ou por maneiras similares. A abordagem adotada na Eq. (2.49), por ser simplesmente a aplicação da média temporal sobre a forma instantânea da RTE, é a solução exata, considerando totalmente os efeitos da interação turbulência-radiação; por isso, por conveniência, ela é chamada, nesta dissertação, de solução “com TRI”. Já qualquer metodologia que envolva calcular a intensidade de radiação média (ou outra quantidade média relacionada à radiação térmica, como o fluxo de calor radiativo ou o termo fonte radiativo) a partir de outras grandezas médias, como é feito na Eq. (2.50), é denominada de solução “sem TRI”, pois procedendo-se dessa maneira estão sendo negligenciados, de alguma forma e em algum nível, os efeitos do TRI.

2.6.2 Fluxo de calor e termo fonte radiativo médios

As médias temporais do fluxo de calor radiativo nas paredes e da contribuição volumétrica da radiação térmica para a equação da energia são grandezas importantes nesta dissertação porque são através delas que a relevância do TRI no problema é analisada. Ou seja, seus valores obtidos pelas soluções “com TRI” e “sem TRI” são comparados para se ter uma ideia da magnitude dos efeitos do fenômeno.

Assim como no caso da RTE, as diferenças entre as abordagens que consideram e que negligenciam o TRI ficam evidentes com a aplicação do operador média temporal às equações instantâneas do fluxo de calor radiativo na parede e do termo fonte radiativo, Eqs. (2.30) e (2.33), respectivamente. Nesta seção e também ao longo do restante do texto, é adotado o subscrito $\langle \rangle_{TRI}$ para médias temporais calculadas diretamente das expressões instantâneas (isto é, a solução exata ou a solução “com TRI”) e o subscrito $\langle \rangle_{nTRI}$ quando esse não for o caso e as grandezas forem obtidas a partir de outras variáveis médias.

Procedendo-se como na subseção anterior e assumindo que a emissividade na superfície não varia com o tempo, tem-se, para o fluxo de calor radiativo médio nas paredes

$$\langle q''_{r,w} \rangle_{TRI} = \varepsilon_w \left[\int_{\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}_{in} < 0} |\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}_{in}| \langle I \rangle_{TRI} d\Omega_{in} - \pi \langle I_{b,w}(T) \rangle \right] \quad (2.51)$$

$$\langle q''_{r,w} \rangle_{nTRI} = \varepsilon_w \left[\int_{\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}_{in} < 0} |\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}_{in}| \langle I \rangle_{nTRI} d\Omega_{in} - \pi I_{b,w}(\langle T \rangle) \right] \quad (2.52)$$

e, para o termo fonte radiativo:

$$\langle S_r \rangle_{TRI} = \langle \kappa(Y, T) U \rangle_{TRI} - 4\pi \langle \kappa(Y, T) I_b(T) \rangle \quad (2.53)$$

$$\langle S_r \rangle_{nTRI} = \kappa(\langle Y \rangle, \langle T \rangle) \langle U \rangle_{nTRI} - 4\pi \kappa(\langle Y \rangle, \langle T \rangle) I_b(\langle T \rangle) \quad (2.54)$$

onde as Eqs. (2.51) e (2.53) correspondem às soluções “com TRI”, e as Eqs. (2.52) e (2.54) , às soluções “sem TRI”.

3 MODELAGEM NUMÉRICA

No Capítulo 2 foram apresentados a teoria e o equacionamento que descrevem a física do problema analisado no presente trabalho. Neste capítulo, é discutido como esta fundamentação é implementada no código numérico empregado para as simulações realizadas. Primeiramente, contudo, o software computacional utilizado é apresentado.

3.1 Sobre o Fire Dynamics Simulator (FDS)

O *Fire Dynamics Simulator* é um software de simulação numérica baseado na dinâmica dos fluidos computacional desenvolvido inicialmente para a modelagem de escoamentos induzidos por combustão. Suas maiores áreas de aplicação são em problemas envolvendo fumaça e em estudos de ativação de *sprinklers* e detectores de fogo [McGrattan et al., 2015a]. No entanto, o software também é muito empregado em reconstruções de incêndios residenciais e industriais (por exemplo, Chow, 2004, e Shen et al., 2008), e é utilizado ainda em estudos fundamentais de combustão, radiação, dinâmica dos fluidos e até mesmo na análise do TRI [Xin et al., 2005; Yang et al., 2010; Velasco, 2014].

Desenvolvido pelo *National Institute of Standards and Technology* (NIST), ligado ao departamento de comércio dos Estados Unidos, em conjunto com o *VTT Technical Research Centre of Finland*, o FDS foi oficialmente lançado em 2000. Trata-se de um software de domínio público, disponibilizado gratuitamente pelo NIST, que tem colaboradores e codesenvolvedores em diversos centros de pesquisas, e que, desde seu lançamento, recebe periodicamente atualizações e modificações [McGrattan et al., 2015a]. Todas as simulações apresentadas neste trabalho foram realizadas na versão 6.2.0 do software (ou em códigos modificados tendo por base essa versão), datada de 26 de setembro de 2014. Essa versão foi escolhida por ser a mais recente disponível no início da pesquisa; evitou-se incorporar atualizações posteriores do código porque elas poderiam comprometer o trabalho em andamento.

O FDS é construído na linguagem de programação Fortran 90 e seu código-fonte consiste de uma rotina principal e uma série de sub-rotinas. Em sua maioria, cada sub-rotina é responsável por modelar um fenômeno físico individual (existem ainda sub-rotinas que desempenham funções não relacionadas diretamente à isso, como a construção da geometria e a impressão de dados de saída), e a rotina principal as une de forma a construir o algoritmo de solução e resolver o problema acoplado. Ao usuário tradicionalmente cabe apenas a definição do domínio computacional, dos parâmetros de entrada (condições de contorno e condição inicial, espécies químicas envolvidas, etc.) e dos modelos a serem empregados – por exemplo, para a modelagem da turbulência e das reações químicas, entre outros –, a geração da malha, e o estabelecimento de quais quantidades devem ser monitoradas durante o cálculo numérico.

Uma vantagem do FDS é que, por se tratar de um software *open-source*, é possível que

qualquer usuário tenha acesso ao seu código-fonte e compile-o independentemente. Mais do que isso, pode-se alterar o código de modo a incluir novas equações e aprimorar os modelos existentes. Sob a ótica do trabalho realizado nesta dissertação, isso é muito útil, pois permite que a sub-rotina responsável pelo cálculo da radiação térmica, por exemplo, seja modificada de forma a implementar o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza, que não está disponível no código base.

O FDS resolve numericamente uma forma das equações de Navier-Stokes apropriada para escoamentos com baixos números de Mach através do método dos volumes finitos, em uma malha retilínea e deslocada, podendo trabalhar no sistema de coordenadas cartesiano (para problemas bidimensionais ou tridimensionais) e no sistema de coordenadas cilíndrico (para problemas axissimétricos). O algoritmo de solução é um esquema preditor-corretor de segunda ordem no espaço e no tempo. A turbulência é tratada utilizando a simulação de grandes escalas; entretanto, é possível realizar também simulação numérica direta se a malha espacial for suficientemente fina. Para a combustão, que não é estudada no presente trabalho e conseqüentemente não é tratada neste capítulo, emprega-se como padrão um mecanismo de reação química de um passo [McGrattan et al., 2015a; McGrattan et al., 2015b]. A paralelização de certas tarefas de cálculo é realizada utilizando o OpenMP [Chapman et al., 2007], uma interface de programação que explora múltiplas unidades de processamento em uma única máquina; para *clusters* de computadores, o FDS permite a paralelização usando a interface MPI [Gropp et al., 1999].

No restante deste capítulo, são apresentados os tópicos mais importantes do tratamento numérico adotado pelo código no contexto do problema analisado nesta dissertação. Maiores detalhes sobre a metodologia numérica do FDS podem ser encontrados em McGrattan et al., 2015b. Comparações dos vários submodelos implementados com soluções analíticas são feitas em McGrattan et al., 2015c, no volume do guia de referência técnica do código que aborda a sua verificação, e uma discussão aprofundada sobre a validação do FDS pode ser encontrada no volume do guia de referência destinado a este tópico [McGrattan et al., 2015c], em que previsões numéricas são comparadas com resultados de experimentos para uma série de aplicações.

3.2 A aproximação de baixos números de Mach e a equação de estado

O código do FDS adota uma aproximação para a equação de estado através da decomposição da pressão em uma componente de fundo e uma perturbação, seguindo o trabalho de Rehm e Baum, 1978. Nessa decomposição, assume-se que o campo de pressão é uma combinação linear da sua componente de fundo e da perturbação induzida pelo escoamento:

$$p(\mathbf{x}, t) = \varphi(z, t) + \hat{p}(\mathbf{x}, t) \quad (3.1)$$

Assim como a pressão total p , a componente de perturbação \hat{p} é uma função da posição

dentro do domínio computacional e do tempo, enquanto a pressão de fundo \wp é uma função da coordenada vertical z (na direção de atuação da força gravitacional, de forma a incorporar na pressão de fundo os efeitos da estratificação da atmosfera) e do tempo. Para a maior parte das aplicações, com a exceção de casos em que há um aumento da pressão de um compartimento fechado pela presença de fogo ou quando sistemas de ar-condicionado afetam a pressão, \wp varia muito pouco com a altura e com o tempo [Patankar, 1980].

Uma consequência da decomposição da pressão introduzida na Eq. (3.1) é que, para escoamentos com baixos números de Mach, a equação de estado, Eq. (2.7), pode ser reescrita como:

$$\wp = \frac{\rho RT}{M} \quad (3.2)$$

A substituição da pressão total na equação de estado pela pressão de fundo permite eliminar os efeitos de ondas sonoras. Como essas ondas se propagam em velocidades muito superiores que as de escoamentos em problemas típicos de engenharia, para captá-las seriam necessários passos de tempo extremamente pequenos, o que dificultaria a realização de simulações práticas. Assim, a aproximação introduzida pela Eq. (3.2), também chamada de aproximação de baixos números de Mach, é fundamental para o desenvolvimento do código numérico em questão.

Além disso, essa aproximação serve também para outro propósito. Com a decomposição da pressão em duas componentes, a equação de estado é desacoplada das demais equações fundamentais que regem o problema, e, conseqüentemente, reduz-se em um o número de variáveis no sistema a ser resolvido pelo algoritmo numérico [McGrattan et al., 2015b].

3.3 Transporte de massa

Por se tratar de um código desenvolvido principalmente para combustão, o FDS resolve o transporte de massa através da solução das equações de conservação de cada espécie química envolvida no processo – que, quando somadas, resultam na equação da continuidade, Eq. (2.2), introduzida na Seção 2.1 [Turns, 2000]. Além disso, o FDS permite a inclusão de partículas e gotas de tamanho inferior à resolução da malha computacional, que podem adicionar massa (em geral, de uma única espécie) a determinados volumes finitos. Isso é representado por um termo de geração mássica na equação de conservação [McGrattan et al., 2015b].

Contudo, nos casos simulados para esta dissertação, o meio é sempre composto por uma única espécie e a presença de partículas na escala submalha não é considerada. Assim, o termo fonte de massa é nulo e a equação de conservação das espécies químicas se reduz a uma única equação, idêntica à da continuidade. Portanto, para fins de simplicidade e consistência com o que foi discutido no capítulo anterior, nesta subseção a modelagem numérica adotada para o

transporte de massa é apresentada em termos da equação do balanço de massa.

O código do FDS utiliza um esquema de duas etapas, do tipo preditor-corretor, para a solução da equação da continuidade. Na etapa de predição, a massa específica da célula $i j k$ no passo de tempo $n + 1$ é estimada tendo como base as informações do passo de tempo anterior [McGrattan et al., 2015b]:

$$\frac{(\rho)_{i j k}^* - (\rho)_{i j k}^n}{\delta t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho}^{LF} u_i)_{i j k}^n = 0 \quad (3.3)$$

onde i , j e k correspondem às coordenadas da célula nas direções x , y e z , respectivamente, e δt é o passo de tempo. O sobrescrito n indica que a variável é avaliada no passo de tempo anterior, enquanto o asterisco denota uma estimativa de primeira ordem da variável no passo de tempo seguinte ($n + 1$), e $\bar{\rho}^{LF}$ indica que a massa específica é obtida através de um limitador de fluxo aplicado ao valor na face da célula, como é descrito na subseção seguinte.

A etapa do corretor segue a etapa de predição e é dada pela equação [McGrattan et al., 2015b]:

$$\frac{(\rho)_{i j k}^{**} - \frac{1}{2} [(\rho)_{i j k}^* + (\rho)_{i j k}^n]}{\frac{1}{2} \delta t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho}^{LF} u_i)_{i j k}^* = 0 \quad (3.4)$$

onde o duplo asterisco denota um valor corrigido, porém ainda não atualizado pelos termos de geração de massa. Como nesta dissertação esses termos são nulos, a massa específica no instante de tempo $n + 1$ é igual ao seu valor corrigido, ou seja,

$$(\rho)_{i j k} = (\rho)_{i j k}^{**} \quad (3.5)$$

3.3.1 Funções de interpolação

A principal dificuldade na discretização dos termos convectivos de qualquer equação de transporte está no cálculo do valor da grandeza transportada (a massa específica, no caso da equação da continuidade) nas faces dos volumes finitos e do seu fluxo convectivo através dessas fronteiras. Com esse fim, uma interpolação linear a partir dos valores da grandeza avaliados no centro dos volumes finitos pode ser adotada, correspondente a um esquema de diferenças centrais. No entanto, esse esquema é conhecido por gerar níveis intoleráveis de erros de dispersão – isto é, oscilações numéricas espúrias causadas, entre outros fatores, pela presença de coeficientes negativos nas equações discretizadas –, podendo levar a resultados que não são fisicamente válidos, como massa específica negativa ou frações mássicas fora da faixa entre 0 e 1 [Patankar, 1980; Versteeg e Malalasekera, 2007].

Para contornar esse problema, o FDS possui um conjunto de esquemas de interpolação, dentre os quais os principais são os esquemas de valor total decrescente (TVD, do inglês *Total Variation Diminishing*) de segunda ordem CHARM e Superbee. Esquemas do tipo TVD recebem esse nome por garantirem que a variação total do campo de cada escalar resolvido (isto é, a soma do módulo das diferenças entre os valores do escalar em células vizinhas) seja preservada ou diminuída, mas nunca aumentada, ao decorrer do cálculo numérico [Versteeg e Malalasekera, 2007]. Segundo McGrattan et al., 2015b, o esquema Superbee [Roe, 1986] é o mais recomendado para a simulação de grandes escalas, por preservar com certo grau de acuracidade a variação escalar em soluções usando malhas mais grosseiras. Portanto, essa é a formulação adotada no presente trabalho.

Nesse esquema, o valor interpolado de um escalar genérico ϕ – por exemplo, a massa específica ρ nas Eqs. (3.3) e (3.4) – em determinada face $i + \frac{1}{2}$, localizada entre os volumes i (onde a velocidade local do escoamento, na direção normal à face, é u_i) e $i + 1$, é calculado como:

$$\phi_{i+\frac{1}{2}}^{FL} = \begin{cases} \phi_i + \frac{1}{2}B(r_\phi)\delta\phi_{loc} & \text{se } u_i > 0 \\ \phi_{i+1} - \frac{1}{2}B(r_\phi)\delta\phi_{loc} & \text{se } u_i < 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

Nesta equação, $B(r_\phi)$ é chamada de função limitadora e possui expressões diferentes dependendo do esquema de interpolação adotado. No esquema Superbee, $B(r_\phi)$ é dada pela Eq. (3.7), onde r_ϕ é definido como a razão entre a variação local de ϕ , $\delta\phi_{loc}$, e a variação de ϕ a montante, $\delta\phi_{up}$ – ou seja, $r_\phi = \delta\phi_{loc}/\delta\phi_{up}$.

$$B(r_\phi) = \max \left[0, \min(2r_\phi, 1), \min(r_\phi, 2) \right] \quad (3.7)$$

A variação local e a variação a montante do escalar são definidas, respectivamente, como:

$$\delta\phi_{loc} = \phi_{i+1} - \phi_i \quad (3.8)$$

$$\delta\phi_{up} = \begin{cases} \phi_i - \phi_{i-1} & \text{se } u_i > 0 \\ \phi_{i+2} - \phi_{i+1} & \text{se } u_i < 0 \end{cases} \quad (3.9)$$

3.4 A equação da energia e o divergente de velocidade

O código do FDS adota um tratamento pouco convencional para resolver a equação da energia. Com a introdução da aproximação de baixos números de Mach, apresentada na Seção 3.2, essa equação é substituída no algoritmo de solução por uma expressão desenvolvida em termos da divergência da velocidade. Isto é, o divergente de velocidade é isolado a partir da equação da energia formulada em termos da entalpia específica sensível, Eq. (2.6), e através de uma série de manipulações algébricas e numéricas garante-se que, quando a expressão resultante for satisfeita, a equação da energia automaticamente também o seja. Maiores detalhes acerca dessa dedução estão disponíveis no guia de referência técnico sobre a modelagem matemática do FDS [McGrattan et al., 2015b].

A expressão final para a divergência da velocidade, já negligenciando termos que são nulos devido à natureza dos casos simulados nesta dissertação (nomeadamente, a taxa volumétrica de geração de energia devido a reações químicas, a contribuição energética de partículas e gotas da escala submalha e o termo contabilizando o efeito da estratificação da atmosfera), é dada por:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \frac{1}{\rho h_s} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\varphi - \rho h_s) + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} (\varphi - \rho h_s) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + S_r \right] \quad (3.10)$$

O termo de difusão de calor na Eq. (3.10), $\partial(\lambda \partial T / \partial x_i) / \partial x_i$, é resolvido através de diferenças centrais de segunda ordem. A condutividade térmica na interface entre dois volumes adjacentes, necessária para a determinação das diferenças centrais, é avaliada como a média entre seus valores no centro dos mesmos volumes.

Quanto ao termo de advecção, $u_i \partial(\rho h_s) / \partial x_i$, a discretização é mais complexa. Caso não seja tratado com cuidado, pequenos problemas relacionados à difusão numérica nos esquemas de transporte dos escalares podem resultar em erros significativos de conservação na equação da energia implícita na Eq. (3.10). A discussão sobre esse termo é extensa e julga-se não ser necessária a sua abordagem neste texto. Informações detalhadas a respeito podem ser encontradas no guia de referência técnica do FDS [McGrattan et al., 2015b].

3.4.1 Cálculo da temperatura

A temperatura do gás no domínio computacional é avaliada no centro de cada volume, sendo calculada a partir da equação de estado. Por exemplo, para o volume arbitrário $i j k$, a temperatura é computada como:

$$T_{i j k} = \frac{\varphi \mathcal{M}}{\rho_{i j k} R} \quad (3.11)$$

3.4.2 Determinação da entalpia sensível

A entalpia sensível específica para uma espécie química arbitrária χ é uma função da temperatura, calculada com base no calor específico à pressão constante, $c_{p,\chi}$:

$$h_{s,\chi}(T) = \int_{T_0}^T c_{p,\chi}(\xi) d\xi \quad (3.12)$$

onde T_0 é a temperatura de referência, igual a 298,15 K, e ξ é um escalar arbitrário de integração. Os valores de $c_{p,\chi}$ para cada temperatura são obtidos das tabelas NIST-JANAF (JANAF é um acrônimo do inglês *Joint Army-Naval-Air Force*) [Chase, 1998].

3.5 Simplificação do balanço de quantidade de movimento

Por conveniência, o algoritmo de solução do FDS não resolve a equação do balanço de quantidade de movimento LES da forma como é apresentada na Eq. (2.18). Ao invés disso, uma expressão alternativa é proposta, deduzida diretamente do balanço de momento através de algumas manipulações algébricas. Esta expressão é dada por

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial x_i} = F_i \quad (3.13)$$

onde $\partial H/\partial x_i$ e F_i são as componentes do gradiente de H e do vetor \mathbf{F} , respectivamente. O termo H é denominado de gradiente de pressão no guia de referência técnica do FDS – embora o próprio guia reconheça que o nome é equivocado, uma vez que H não é uma pressão verdadeira [McGrattan et al., 2015b] – e é definido na Eq. (3.14), enquanto o vetor \mathbf{F} corresponde ao conjunto de termos que compreendem o fluxo de quantidade de movimento e é dado (mantendo-se a notação indicial) pela Eq. (3.15).

$$H = \frac{\tilde{u}_i \tilde{u}_i}{2} + \frac{\overline{p^*}}{\rho} \quad (3.14)$$

$$F_i = \epsilon_{ijk} \tilde{u}_j \tilde{\omega}_k + \overline{p^*} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\rho} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_T) \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (3.15)$$

Na Eq. (3.15), ϵ_{ijk} é o símbolo de Levi-Civita ($\epsilon_{ijk} = 0$ se quaisquer dois dos índices i , j ou k são iguais entre si; $\epsilon_{ijk} = 1$ se ijk é uma permutação par de 123; e $\epsilon_{ijk} = -1$ se ijk é uma permutação ímpar de 123); e $\tilde{\omega}_k$ é a componente na direção k da vorticidade espacialmente filtrada, definida como o rotacional do vetor velocidade filtrado, Eq. (3.16). Por simplicidade, nas

equações anteriores são omitidos os termos negligenciáveis devido à natureza das simulações realizadas nesta dissertação (por exemplo, termos relativos à força gravitacional e ao arrasto de partículas submalha).

$$\widetilde{\omega}_k = \epsilon_{kji} \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (3.16)$$

Uma observação importante é que, nas Eqs. (3.14) e (3.15), o termo de pressão $\overline{p^\star}$ refere-se à perturbação de pressão \hat{p} – introduzida na Eq. (3.1) – filtrada espacialmente e modificada com a adição da contribuição isotrópica do tensor de tensões da escala submalha τ_{kk}^{sgs} , conforme descrito na Seção 2.3.2 e na Eq. (2.17).

3.5.1 Condições de contorno de velocidade e a lei da parede

Nesta dissertação, são prescritos dois tipos de condições de contorno de velocidade: condição de velocidade prescrita na entrada do escoamento no domínio computacional, e condição de não deslizamento nas paredes. A saída do escoamento é definida por uma condição imposta no cálculo da pressão, que é discutida na Seção 3.6.1.

A implementação numérica de condições de contorno de velocidade prescrita em LES no FDS é simples. Conforme comentado na Seção 2.3.4, o código utiliza o método dos vórtices sintéticos para a imposição do escoamento turbulento. Neste método, para a descrição do escoamento basta prover informações sobre a sua velocidade média, o número de vórtices, a raiz do valor quadrático médio da flutuação de velocidade e a escala de comprimento de vórtices – a definição desses valores nas simulações deste trabalho é apresentada na Seção 4.1.3. A prescrição de velocidade na fronteira de entrada implica também em uma condição prescrita para o cálculo de pressão, que é explicada na Seção 3.6.1.

Na condição de não deslizamento, todas as componentes da velocidade filtrada, \widetilde{u}_i , e da flutuação de velocidade, u'_i , tomam valores nulos nas interfaces dos volumes adjacentes à fronteira. Para a modelagem da tensão viscosa nestes volumes, ou da tensão viscosa na parede, τ_w , o FDS utiliza um perfil logarítmico de velocidade. Definindo-se a velocidade de fricção como $u_\tau \equiv \sqrt{\tau_w/\rho}$, a partir da qual pode-se definir a velocidade adimensional $u^+ \equiv \widetilde{u}/u_\tau$, e estabelecendo-se também uma distância adimensional da parede como $y^+ \equiv \rho u_\tau y/\mu$, o FDS implementa a lei da parede através da expressão [McGrattan et al., 2015b]:

$$u^+ = \begin{cases} y^+ & \text{para } y^+ < 11,81 \\ \frac{1}{C_\kappa} \ln y^+ + 5,2 & \text{para } y^+ \geq 11,81 \end{cases} \quad (3.17)$$

Com a determinação de u^+ , a tensão viscosa pode ser obtida como:

$$\tau_w = \rho \left(\frac{\tilde{u}}{u^+} \right)^2 \quad (3.18)$$

Geralmente, a determinação de τ_w exige um processo iterativo, uma vez que o valor da tensão viscosa na parede é necessário para definir-se y^+ . A estratégia adotada pelo FDS é de primeiramente calcular a tensão na parede como se o escoamento fosse localmente laminar e então usar esse valor como uma estimativa inicial para o cálculo. Segundo o guia de referência do código, testes efetuados mostraram que três iterações são suficientes para convergir o erro residual do modelo até cerca de 1 % [McGrattan et al., 2015b].

3.6 A equação para a pressão (equação de Poisson)

Com a adoção da aproximação de baixos números de Mach, o cálculo da pressão – especificamente, da perturbação de pressão induzida pelo escoamento, \hat{p} – fica desacoplado do sistema de equações que permitem obter as demais incógnitas principais do problema (isto é, as componentes de velocidade, a massa específica e a temperatura). Para contornar essa dificuldade, o FDS introduz uma equação adicional para a determinação da pressão.

Essa expressão é obtida aplicando o operador divergente ao balanço da quantidade de movimento. Após algumas manipulações, o resultado é uma equação diferencial parcial elíptica conhecida como equação da Poisson, que pode ser escrita como [McGrattan et al., 2015b]:

$$\frac{\partial^2 H}{\partial x_i \partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial F_i}{\partial x_i} \quad (3.19)$$

Lembrando das definições de H e F_i , Eqs. (3.14) e (3.15), tem-se que a componente de perturbação de pressão está presente em ambos os lados da igualdade na Eq. (3.19). No algoritmo de solução, o termo de pressão do lado direito da equação é tomado como sendo igual ao valor calculado no passo de tempo anterior, podendo ainda ser negligenciado caso o escoamento tenha massa específica constante, e a perturbação de pressão no lado esquerdo da igualdade, incorporada ao termo H , é resolvida diretamente. A razão pela qual o termo de pressão é decomposto e tratado de tal forma é que, assim, o sistema linear algébrico resultante da discretização da Eq. (3.19) possui coeficientes constantes e pode ser resolvido de forma direta (isto é, sem necessitar de um procedimento iterativo) por um método que implemente transformadas rápidas de Fourier [Sweet, 1973].

3.6.1 Condições de contorno de pressão

Com exceção da condição de contorno mais complexa na interface entre malhas – que não é empregada nas simulações desta dissertação e, portanto, não é tratada aqui – o FDS considera apenas dois tipos de condição nas fronteiras para o cálculo da pressão: a condição de fluxo nulo, para modelar superfícies sólidas, e a condição aberta de pressão, para fronteiras por onde o escoamento entra ou deixa o domínio computacional [McGrattan et al., 2015b].

A condição de fluxo nulo é de fácil implementação no algoritmo de solução direta da equação de Poisson, através de uma condição de contorno de Neumann com $\partial \tilde{u}_i / \partial t = 0$. A validade dessa igualdade se deve ao fato de a componente normal da velocidade ser nula em uma fronteira desse tipo desde o início do cálculo. Para uma superfície normal à direção x , por exemplo, a forma discretizada da condição de contorno de fluxo nulo é dada por

$$\frac{H_{i+1,jk} - H_{i,jk}}{\delta x} = -F_{x,i,jk} \quad (3.20)$$

onde $F_{x,i,jk}$ é a componente do vetor \mathbf{F} na direção x avaliada no centro do volume finito.

Por outro lado, na condição do tipo aberta, independentemente do sentido do escoamento, assume-se que H é constante ao longo das linhas de corrente e que a perturbação de pressão na fronteira é igual a zero. Nesse tipo de fronteira, a equação de Poisson para H requer uma condição de contorno de Dirichlet para a sua solução – ou seja, a especificação do valor dessa variável no contorno do domínio de cálculo. Considerando-se por exemplo a fronteira $x = x_{min}$, onde x_{min} é a menor cota x dentro do domínio computacional, o valor de H na fronteira é dado pela Eq. (3.21), caso a componente de velocidade local na direção x seja negativa (ou seja, se o escoamento estiver deixando o domínio), ou pela Eq. (3.22), caso a componente de velocidade nessa mesma direção seja positiva (escoamento entrando no domínio computacional) [McGrattan et al., 2015b].

$$H_{\frac{1}{2},jk} = \frac{1}{2} \left(\bar{u}_{1,jk}^2 + \bar{v}_{1,jk}^2 + \bar{w}_{1,jk}^2 \right) \quad (3.21)$$

$$H_{\frac{1}{2},jk} = \frac{1}{2} \left(u_{\infty}^2 + v_{\infty}^2 + w_{\infty}^2 \right) \quad (3.22)$$

Nessas equações, os índices $i = 1$ e $i = \frac{1}{2}$ correspondem, respectivamente, ao primeiro volume na direção x e à sua face (normal à direção x) em contato com a fronteira. A pequena barra sobre as componentes de velocidade (\bar{u} , \bar{v} e \bar{w}) indica uma média sobre os seus valores (especialmente filtrados) avaliados nas faces do volume, e o índice ∞ denota valores prescritos de velocidade na fronteira.

3.7 A equação da transferência radiativa

Esta seção apresenta a modelagem numérica adotada pelo FDS para a equação da transferência radiativa, que consiste na sua integração angular (ou seja, sobre todas as direções pelas quais a intensidade de radiação se propaga) e na sua integração espacial (sobre cada volume finito utilizado para a discretização do domínio computacional). Por brevidade, é exemplificado aqui apenas o procedimento numérico empregado para a RTE no modelo WSGG, Eq. (2.44). O tratamento da equação da transferência radiativa no modelo do gás cinza é similar, porém não envolve o somatório sobre todos os gases cinza e o coeficiente de temperatura $a_j(T)$ usado no modelo WSGG é igual à unidade.

3.7.1 Discretização angular

Para obter a forma discretizada da RTE, a esfera unitária que compreende todos os ângulos ao redor de determinado ponto pelos quais a intensidade pode se propagar é dividida em um número finito de ângulos sólidos, ou ângulos de controle. A Figura 3.1 mostra uma representação esquemática da esfera unitária e de um ângulo de controle arbitrário, correspondente à direção s de propagação e caracterizado pelo ângulo polar θ e pelo ângulo azimutal φ .

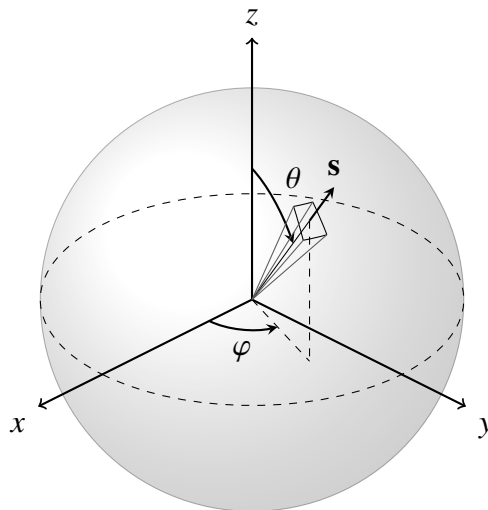


Figura 3.1 – Representação da esfera unitária e do ângulo de controle utilizados para a discretização angular da RTE.

A discretização da esfera unitária é feita dividindo primeiramente o ângulo polar θ em certo número N_θ de bandas, em que N_θ é um número inteiro par. Cada banda θ é então dividida em $N_\varphi(\theta)$ na direção azimutal ϕ , com a condição de $N_\varphi(\theta)$ ser um múltiplo de 4 [McGrattan et

al., 2015b]. O número total de ângulos de controle, N_Ω , é então calculado como:

$$N_\Omega = \sum_{i=1}^{N_\theta} N_\varphi(\theta_i) \quad (3.23)$$

A definição do número de divisões nas direções polar e azimutal é feita tendo como base regras empíricas que tentam produzir ângulos sólidos iguais, tal que $\delta\Omega^l = 4\pi/N_\Omega$, onde $\delta\Omega^l$ é o tamanho do ângulo de controle l . O número de bandas em θ é dado pela Eq. (3.24), arredondada para o número inteiro par mais próximo, enquanto o número de divisões em φ em cada banda é definido pela expressão apresentada na Eq. (3.25), arredondada para o número inteiro divisível por 4 mais próximo, onde θ^- e θ^+ são os limites superior e inferior da banda θ , respectivamente.

$$N_\theta = 1,17N_\Omega^{1/2,26} \quad (3.24)$$

$$N_\varphi(\theta) = \max \{4; 0,5N_\Omega [\cos(\theta^-) - \cos(\theta^+)]\} \quad (3.25)$$

A discretização angular adotada pelo FDS é simétrica em relação aos planos $x = 0$, $y = 0$ e $z = 0$, o que traz duas vantagens principais para a implementação da metodologia numérica empregada. Primeiramente, evita-se problemas causados pelo fato de o esquema *upwind* de primeira ordem utilizado para calcular as intensidades de radiação nas fronteiras dos volumes (como é descrito a seguir) ser mais difusivo em direções não axiais do que em direções axiais. A segunda vantagem dessa simetria é garantir que o produto escalar entre a direção de propagação da intensidade, \mathbf{s} , e os vetores unitários (\mathbf{i} , \mathbf{j} ou \mathbf{k}) não mude de sinal dentro do ângulo de controle; caso isso acontecesse, a solução do sistema de equações lineares da RTE discretizada seria muito mais complexa [McGrattan et al., 2015b].

3.7.2 Discretização espacial

A malha computacional usada para a solução numérica da equação da transferência radiativa é a mesma que a utilizada para o problema hidrodinâmico. A RTE é resolvida numericamente utilizando o método dos volumes finitos [Raithby e Chui, 1990], cujo nome deriva do fato de essa metodologia ser similar à empregada para o tratamento do transporte convectivo em métodos de volumes finitos para escoamentos. Mais detalhes sobre a implementação dessa metodologia podem ser encontrados em Hostikka, 2008, e em McGrattan et al., 2015b.

Após a discretização angular, feita seguindo o método descrito na subseção anterior, tem-se um número finito de ângulos de controle (que correspondem às direções nas quais a intensidade de radiação se propaga) ocupando certas posições conhecidas dentro da esfera unitária. Então, o domínio computacional é dividido em uma malha numérica de volumes

finitos e, para cada célula e para cada direção, a RTE é integrada, tanto sobre o volume da célula como sobre o ângulo de controle correspondente àquela direção.

Supõe-se que a intensidade de radiação é constante dentro de cada ângulo de controle e dentro de cada volume finito, bem como sobre cada uma das faces do volume. Adicionalmente, assume-se que a intensidade de corpo negro também não varia dentro de cada volume. A partir dessas considerações, e definindo-se uma célula arbitrária $i\ j\ k$, de volume $V_{i\ j\ k}$, e um ângulo de controle arbitrário l , de tamanho $\delta\Omega^l$, a forma inicial da equação da transferência radiativa (no modelo WSGG) discretizada é dada por

$$\sum_{f=1}^6 A_f I_{g,f}^l D_f^l = \kappa_g \left[(a_g I_b)_{i\ j\ k} - I_{g,i\ j\ k}^l \right] \quad (3.26)$$

onde f indica cada uma das faces do volume, A_f é a área da face f , $I_{g,f}^l$ é a intensidade de radiação do gás cinza g na face f , $I_{g,i\ j\ k}^l$ é a intensidade de radiação do gás g dentro do ângulo sólido l e do volume $i\ j\ k$, e $(a_g I_b)_{i\ j\ k}$ é o produto do coeficiente de temperatura pela intensidade de corpo negro avaliado na temperatura do volume $i\ j\ k$. D_f^l representa a integração

$$D_f^l = \int_{\delta\Omega^l} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_f) ds \quad (3.27)$$

onde \mathbf{n}_f é o vetor unitário normal à face f .

As intensidades de radiação na face do volume de controle, $I_{g,f}^l$, que aparecem do lado esquerdo da Eq. (3.26), são calculadas usando um esquema *upwind* de primeira ordem [Patankar, 1980]. Considerando-se, por exemplo, um ângulo de controle correspondente ao vetor direção \mathbf{s} : se a radiação está viajando no sentido positivo da direção x (isto é, $\mathbf{s} \cdot \mathbf{i} \geq 0$), assume-se que a intensidade na face a montante, I_{xu}^l (o índice u representa uma grandeza a montante, *upwind*, enquanto o índice d representa uma grandeza a jusante, *downwind*), é igual ao seu valor no volume vizinho na direção x , $I_{i-1,j\ k}^l$, e que a intensidade na face a jusante I_{xd}^l é igual ao valor da intensidade na própria célula – ou seja, a variável a ser determinada, $I_{i\ j\ k}^l$. De forma análoga, se a radiação viaja no sentido negativo de x , $I_{xu}^l = I_{i+1,j\ k}^l$ e $I_{xd}^l = I_{i\ j\ k}^l$.

Além disso, na malha retilínea empregada pelo FDS, os coeficientes D_f^l são, por definição, iguais, mas de sinais opostos. Portanto, $D_{xu}^l = -D_{xd}^l$, e o mesmo é válido para as outras duas direções principais. Assim, a Eq. (3.26) pode ser simplificada, chegando ao formato final da equação da transferência radiativa discretizada, no modelo WSGG:

$$\alpha_{g,i\ j\ k}^l I_{g,i\ j\ k}^l = \alpha_x^l I_{g,xu}^l + \alpha_y^l I_{g,yu}^l + \alpha_z^l I_{g,zu}^l + \beta_{g,i\ j\ k}^l \quad (3.28)$$

onde os coeficientes α^l e β^l são definidos como:

$$\alpha_{g,i,jk}^l = \alpha_x^l + \alpha_y^l + \alpha_z^l + \beta_{g,i,jk}^l \quad (3.29)$$

$$\alpha_x^l = A_x |D_x^l| \quad (3.30)$$

$$\alpha_y^l = A_y |D_y^l| \quad (3.31)$$

$$\alpha_z^l = A_z |D_z^l| \quad (3.32)$$

$$\beta_{g,i,jk}^l = \kappa_g (a_g I_b)_{i,jk} V_{i,jk} \delta\Omega^l \quad (3.33)$$

Nessas equações, A_x , A_y e A_z são as áreas das faces do volume finito nas direções x , y , e z , respectivamente, e os coeficientes D^l e $\delta\Omega^l$ são calculados como:

$$D_x^l = \frac{1}{2} (\sin \varphi^+ - \sin \varphi^-) [(\theta^+ - \theta^-) (\cos \theta^+ \sin \theta^+ - \cos \theta^- \sin \theta^-)] \quad (3.34)$$

$$D_y^l = \frac{1}{2} (\cos \varphi^+ - \cos \varphi^-) [(\theta^+ - \theta^-) (\cos \theta^+ \sin \theta^+ - \cos \theta^- \sin \theta^-)] \quad (3.35)$$

$$D_z^l = \frac{1}{2} (\varphi^+ - \varphi^-) [(\sin \theta^+)^2 - (\sin \theta^-)^2] \quad (3.36)$$

$$\delta\Omega^l = (\varphi^+ - \varphi^-) (\cos \theta^- - \cos \theta^+) \quad (3.37)$$

onde φ^+ e φ^- são, respectivamente, o limite superior e o limite inferior da banda φ .

O método de solução da Eq. (3.28) é baseado em uma sequência de marcha explícita [Kim and Huh, 1999], em que o sentido da solução do sistema de equações depende do sentido de propagação da intensidade de radiação. Por exemplo, fazendo a marcha no “sentido jusante”, as intensidades a montante nas três direções espaciais são conhecidas e a intensidade $I_{g,i,jk}^l$ pode ser determinada diretamente da solução da equação algébrica; no primeiro volume a ser resolvido, todas as intensidades a montante são obtidas das condições de contorno. Dessa forma, não há a necessidade de um processo iterativo, que, teoricamente, seria requerido caso houvesse reflexão ou espalhamento dentro do meio ou se este fosse opticamente muito espesso. O algoritmo de solução do FDS negligencia esses cenários e nenhuma iteração é feita.

3.7.3 Condições de contorno para a radiação térmica

Embora o FDS permita a consideração de paredes cinzas, em todas as simulações realizadas nesta dissertação as superfícies do domínio são modeladas como negras. Então, por simplicidade, apenas esse caso é apresentado.

A intensidade de radiação deixando esse tipo de superfície é dada, na forma discretizada e para o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza, por

$$I_{g,w}^l = a_g(T_w) \frac{\sigma T_w^4}{\pi} \quad (3.38)$$

onde $I_{g,w}^l$ é a intensidade de radiação na fronteira, contida dentro do ângulo de controle l e para o gás cinza g , $a_g(T_w)$ é a função do coeficiente de temperatura no modelo WSGG, avaliada na temperatura da superfície, e $\sigma T_w^4/\pi$ corresponde à intensidade de corpo negro, também na superfície.

A Eq. (3.38) define a condição de contorno para uma superfície negra, mas também é aplicável para o tratamento de fronteiras abertas para o exterior ou de fronteiras nas quais a entrada de fluido é prescrita. Nesses casos, a temperatura T_w é igual ao valor do reservatório (ou do ambiente) externo ou igual à temperatura do escoamento prescrito, respectivamente. Para o modelo do gás cinza, a mesma Eq. (3.38) se aplica como condição de contorno, porém faz-se $a_g(T_w) = 1$ e o subscrito g na intensidade de radiação é omitido.

3.8 Restrições de passo de tempo e estabilidade numérica

Juntamente com outros requisitos, a estabilidade é um importante fator na convergência de uma solução numérica para a solução exata. Um esquema numérico é dito estável quando a sua solução para determinado problema é pouco afetada por pequenas mudanças nos dados de entrada desse problema. Isso garante que qualquer erro introduzido no processo de solução não seja amplificado com o prosseguimento do cálculo e cause uma possível divergência [Li, 2006].

Esquemas explícitos estão sujeitos a instabilidades caso o incremento na direção da marcha de cálculo (no caso, para um problema transiente, o incremento temporal δt) exceda certo valor. A princípio, a definição desse valor máximo é determinada por uma análise formal de estabilidade das equações governantes do problema na forma discretizada. No entanto, uma análise desse tipo não existe para equações como as de Navier-Stokes, de modo que abordagens simplificadas devem ser adotadas [Anderson, 1995]. Nesta seção, são apresentadas as aproximações adotadas pelo FDS, ou as condições de estabilidade, na presença de advecção, difusão e expansão dos campos de velocidade e de escalares.

3.8.1 O critério de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL)

O critério de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), desenvolvido por esses autores em 1928, estabelece, como condição necessária para a estabilidade numérica, a exigência que o domínio de dependência do método numérico deva incluir o domínio de dependência da equação diferencial parcial que está sendo resolvida [Blazek, 2001]. No FDS, esse critério é expresso da forma dada na Eq. (3.39). Uma dedução dessa equação, baseada na decomposição da solução em uma série de Fourier, pode ser encontrada em livros sobre dinâmica dos fluidos computacional (por exemplo, em Anderson, 1995, e em Blazek, 2001).

$$C = \delta t \max \left(\frac{|\bar{u}|}{\delta x}, \frac{|\bar{v}|}{\delta y}, \frac{|\bar{w}|}{\delta z} \right) \approx 1 \quad (3.39)$$

Na Eq. (3.39), C é chamado de número de Courant, δx , δy e δz são as dimensões do volume finito nas direções x , y e z , respectivamente.

Portanto, o critério CFL coloca uma restrição no passo de tempo devido à velocidade de advecção. Fisicamente, esse critério pode ser interpretado como o requisito de que a distância viajada por uma partícula no decorrer de um passo de tempo não seja maior que o tamanho das células da malha computacional, para evitar que informações sobre a partícula sejam perdidas [Li, 2006].

3.8.2 Restrição de massa específica

Na atualização explícita da equação da continuidade, caso o passo de tempo seja muito elevado, pode-se chegar a um cenário em que a massa específica é nula em determinados volumes computacionais, o que não é uma situação fisicamente válida em um escoamento. Portanto, a condição $\rho^{n+1} > 0$ leva à seguinte restrição ao passo de tempo [McGrattan et al., 2015b]:

$$\delta t < \frac{\rho^n}{\frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho}^{LF} \bar{u}_i)^n} \quad (3.40)$$

Sob a ótica dessa restrição, a situação mais crítica é quando $\rho^{n+1} > 0$ se aproxima de zero. Nesse caso, a Eq. (3.40) pode ser aproximada como (omitindo-se, por simplicidade, o índice temporal):

$$\delta t < \left[\frac{\bar{u}_i}{\delta x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \right]^{-1} \quad (3.41)$$

sendo essa condição necessária para cada volume $i j k$ do domínio computacional.

3.8.3 Restrição de volume de fluido

A conservação de massa dita que a taxa de mudança de um elemento fluido com massa ρV é constante no tempo. Isso pode ser escrito como

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial t} + \tilde{u}_i \frac{\partial V}{\partial x_i} \right) \quad (3.42)$$

onde V é o volume do elemento fluido.

Essa expressão implica em uma restrição adicional no passo de tempo. No caso de o volume de fluido estar sob compressão (ou seja, $\partial u_i / \partial x_i < 0$), a condição de positividade do volume de elemento fluido, considerando uma atualização explícita da Eq. (3.42), requer que o passo de tempo seja limitado por [McGrattan et al., 2015b]:

$$\delta t < - \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right)^{-1} \quad (3.43)$$

3.8.4 Critério geral para o passo de tempo

As condições estabelecidas pelo critério de Courant-Friedrichs-Lewy, pelas restrições de massa específica e de volume de fluido – Eqs. (3.39), (3.41) e (3.43) – são similares e análogas em alguns aspectos. Portanto, o FDS opta por adotar uma condição adaptada do critério CFL, dada por [McGrattan et al., 2015b]:

$$C_{mod} = \delta t \left[\max \left(\frac{|\tilde{u}|}{\delta x}, \frac{|\tilde{v}|}{\delta y}, \frac{|\tilde{w}|}{\delta z} \right) + \left| \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right| \right] \approx 1 \quad (3.44)$$

O código numérico utilizado permite o ajuste do valor do passo do tempo a cada novo incremento temporal, de maneira a sempre manter o valor de C_{mod} em determinada faixa (em geral, próximo à unidade). Contudo, por razões práticas, tal procedimento não é adotado nesta dissertação. Ao invés disso, emprega-se o mesmo passo de tempo desde o início do cálculo e verifica-se periodicamente se o valor do número de Courant modificado atende ao critério estabelecido na Eq. (3.44). Uma discussão sobre os valores de C_{mod} encontrados nas simulações deste trabalho é feita na Seção 4.3.4.

4 METODOLOGIA

Neste capítulo, são descritos os procedimentos adotados para a obtenção dos resultados apresentados e discutidos no Capítulo 5. É feita a apresentação do problema resolvido, incluindo a geometria utilizada e as condições de contorno prescritas; descreve-se como o domínio de cálculo é discretizado no espaço e no tempo para a solução numérica; a análise da qualidade da discretização é abordada; a metodologia empregada para a análise do TRI é discutida; e, por fim, são detalhados os parâmetros de cada caso rodado nesta dissertação.

4.1 Descrição do problema

4.1.1 Configuração geométrica

O problema analisado neste trabalho consiste no escoamento turbulento não reativo homogêneo de um gás participante composto por uma única espécie química, que se desenvolve em um duto de seção transversal quadrangular. O duto, cuja geometria é dada na Figura 4.1, possui largura e altura iguais à 0,5 m, correspondendo a um diâmetro hidráulico D_h também de 0,5 m, e um comprimento de $10,5D_h$, ou 5,25 m.

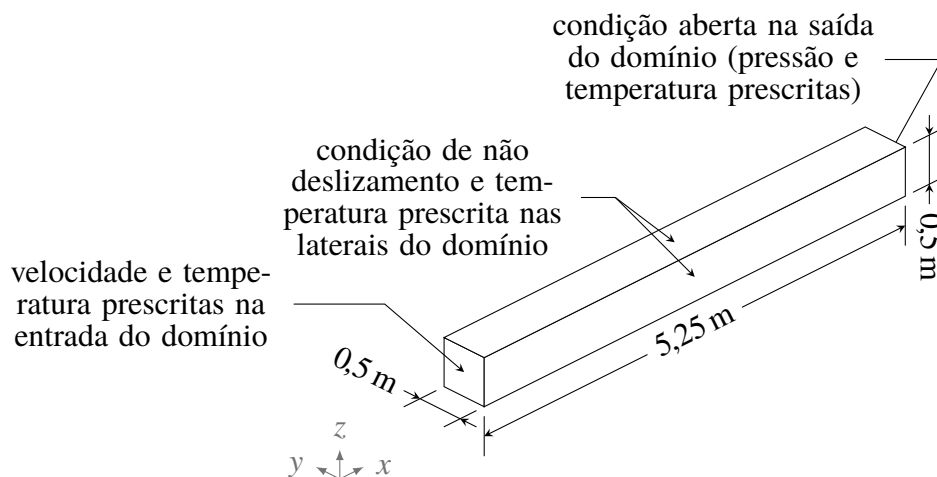


Figura 4.1 – Geometria do duto modelado e condições de contorno impostas nas simulações numéricas realizadas nesta dissertação.

O eixo do sistema de coordenadas mostrado na Figura 4.1 serve apenas para indicar quais são as direções principais que correspondem a cada dimensão do duto; no entanto, em todas as simulações realizadas, posiciona-se a origem do sistema coordenado no início do domínio computacional, no ponto inferior direito da seção transversal.

A geometria utilizada é semelhante àquela empregada por Velasco, 2014, que também

realizou uma análise sobre o TRI em um escoamento não reativo. No presente estudo, segue-se a metodologia adotada por Velasco, 2014, de modelar um trocador de calor idealizado, dentro das limitações do código numérico empregado em termos de geração da geometria e da malha computacional. As dimensões do duto, portanto, são da ordem de grandeza das dimensões dos tubos encontrados nesse tipo de equipamento. Quanto à configuração geométrica, a escolha de uma seção transversal retangular é justificada pela incapacidade do FDS (ao menos na versão disponível quando do desenvolvimento deste trabalho) em trabalhar com geometrias e malhas tridimensionais em formatos não retilíneos.

4.1.2 Condição inicial e condições de contorno

Para a escolha das condições de contorno e da condição inicial para as simulações computacionais, novamente o trabalho de Velasco, 2014, é usado como referência. Conforme esse trabalho, as condições de contorno são definidas de modo a melhor retratar o problema hidrodinâmico e a transferência de energia que se desenvolve em um trocador de calor, como nos dutos de uma caldeira flamotubular, dentro dos quais gases aquecidos escoam e trocam calor com a parede.

A Figura 4.1 apresenta as condições de contorno impostas em cada uma das superfícies do domínio computacional que modela o duto. A seção transversal correspondente ao plano $x = x_{min}$, onde x_{min} é o menor valor em x dentro do domínio, é escolhida como a seção de entrada do escoamento. Nela, são definidos todos os parâmetros necessários para caracterizar um escoamento turbulento no método dos vórtices sintéticos, conforme é detalhado na Seção 4.1.3. Quanto à condição térmica, supõe-se que o escoamento entra no domínio de cálculo com temperatura espacialmente uniforme (ou seja, sem variações em y e z nesta seção) e constante no tempo, igual a 1200 K. Para o cálculo da transferência radiativa, assume-se que essa fronteira se comporta como uma superfície negra, na mesma temperatura de 1200 K.

De forma equivalente, a saída do escoamento ocorre na seção transversal contida no plano $x = x_{max}$, sendo x_{max} a maior cota x dentro do domínio. Nessa fronteira é imposta uma condição aberta para o exterior, cujo tratamento numérico é explicado na Seção 3.6.1. A ideia é modelar a seção de saída do domínio computacional como a superfície que marca o final do duto e o início de um grande reservatório à pressão ambiente e com temperatura uniforme. Para isso, prescreve-se nessa superfície uma pressão uniforme e constante de 101 325 Pa; quanto ao valor a ser adotado para a temperatura nessa fronteira, correspondente à temperatura do reservatório externo, é necessário a utilização de um processo iterativo, conforme é discutido na Seção 4.1.4.

As laterais do domínio – ou seja, as superfícies contidas nos planos xy e xz – representam as paredes do duto. Nessas fronteiras são impostas condições de não deslizamento e de fluxo nulo; as suas temperaturas são constantes e uniformes, todas em 400 K, e elas são consideradas como superfícies negras para o cálculo da radiação térmica (isto é, sua emissividade é igual à unidade). Segundo Velasco, 2014, a justificativa para a prescrição da condição de temperatura

constante nas laterais do domínio está na suposição de que, nas paredes de um duto desse tipo em um trocador de calor, ocorre externamente um processo de troca de fase.

O fluido de trabalho envolvido no problema é um gás participante homogêneo, composto por uma única espécie química, cuja concentração não varia nem no espaço nem no tempo (ou seja, sua fração molar e sua fração mássica são iguais à unidade). Dois casos são considerados: em um deles, o gás é composto unicamente por dióxido de carbono, e, no outro, constituído em sua totalidade por vapor de água. A escolha pela utilização de fluidos de trabalho compostos por uma única substância, em oposição a misturas de espécies, se dá pela sua maior simplicidade de modelagem dentro do código numérico empregado.

A condição inicial para o cálculo numérico é de temperatura igual a 600 K, uniforme sobre todo o domínio computacional, e pressão igual à pressão do reservatório externo. É assumido ainda que inicialmente o domínio já está preenchido pelo fluido de trabalho, porém o seu campo de velocidades é nulo. Como, nesta dissertação, as médias temporais realizadas para a obtenção e análise dos resultados são tomadas apenas após o escoamento ter se desenvolvido por uma quantidade de tempo suficientemente longa, é esperado que a condição inicial do problema não afete os resultados encontrados.

4.1.3 Parâmetros de entrada para o método dos vórtices sintéticos

Conforme discutido na Seção 2.3.4, para a imposição da condição de escoamento turbulento o FDS utiliza o chamado método dos vórtices sintéticos. Esse método exige como dados de entrada a velocidade média de mistura do escoamento principal, o número de vórtices, a escala de comprimento de vórtices e a raiz do valor quadrático médio da flutuação de velocidade, podendo este último parâmetro ser substituído pelo tensor de tensões de Reynolds.

Nesta dissertação, a velocidade média de mistura u_{med} do escoamento principal é obtida a partir do número de Reynolds baseado no diâmetro hidráulico, Re , definido na Eq. (4.1), que, em todas as simulações numéricas realizadas, é mantido constante em 5100. Esse valor é escolhido por ser alto o suficiente para garantir que o escoamento seja turbulento [Bejan, 2004; Bergman et al., 2011], mas reduzido o suficiente para não exigir níveis de discretização espacial e temporal excessivamente refinados.

$$Re = \rho \frac{u_{med} D_h}{\mu} \quad (4.1)$$

Embora a geometria do problema (e, por consequência, o diâmetro hidráulico) seja sempre a mesma, os valores da massa específica e da viscosidade dinâmica são diferentes para substâncias distintas, o que implica em diferentes velocidades médias dependendo do gás utilizado na simulação. Para os dois gases participantes utilizados neste trabalho – dióxido de carbono e vapor de água –, essas propriedades físicas, avaliadas na temperatura do escoamento na

seção de entrada do domínio, são mostradas na Tabela 4.1, juntamente com as correspondentes velocidades médias de mistura.

Tabela 4.1 – Algumas propriedades físicas, avaliadas na temperatura em que o escoamento entra no domínio computacional, e parâmetros de entrada para os gases utilizados nesta dissertação.

Parâmetros	CO ₂	H ₂ O
ρ (kg/m ³)	0,4575	0,1830
μ (Pa s)	$4,603 \times 10^{-5}$	$4,505 \times 10^{-5}$
u_{med} (m/s)	1,0263	2,5114
$IT = 0\%$	0	0
$IT = 5\%$	0,0513	0,1256
u'_{RMS} (m/s) $IT = 10\%$	0,1026	0,2511
$IT = 15\%$	0,1539	0,3767
$IT = 20\%$	0,2053	0,5023

A raiz do valor quadrático médio da flutuação de velocidade, u'_{RMS} , é calculada a partir da velocidade média de mistura e da definição de intensidade de turbulência, IT , dada na Eq. (4.2). Cinco níveis distintos de intensidade de turbulência são considerados, em uma faixa de 0% à 20%, o que resulta em cinco valores diferentes para u'_{RMS} (para cada gás), conforme é dado na Tabela 4.1. A escolha dessa faixa de valores para IT é feita seguindo o trabalho de Velasco, 2014.

$$IT = \frac{u'_{RMS}}{u_{med}} \quad (4.2)$$

Não foi encontrada nenhuma recomendação na literatura quanto ao número de vórtices, N_e , com exceção do que é reportado pelo próprio proponente do método dos vórtices sintéticos em sua tese [Jarrin, 2008]. Nesse trabalho, o autor realizou um estudo paramétrico em condições de turbulência homogênea isotrópica, testando valores de N_e igual a 10, 100, 1000 e 10 000 e comparando quantidades estatísticas obtidas numericamente com resultados exatos. Em resumo, encontrou-se que, quanto menor o número de vórtices, mais intermitente é o sinal de velocidade, apresentando picos esporádicos e grandes faixas sem qualquer flutuação; por outro lado, o aumento de N_e implica em um aumento no custo computacional para a geração dos dados de turbulência na entrada. Quanto aos extremos, na simulação com $N_e = 10$, além do sinal irregular de velocidade, foram observadas amplas regiões sem qualquer flutuação entre alguns poucos vórtices com grande energia, enquanto o cálculo inicializado com 10 000 vórtices mostrou um comportamento indesejável da função densidade de probabilidade do sinal de velocidade nas

suas extremidades, por essas zonas corresponderem a eventos muito improváveis.

Assim, nesta dissertação, adota-se um valor intermediário de N_e igual a 1000 em todas as simulações, o mesmo valor também utilizado por Velasco, 2014. Nas análises de Jarrin, 2008, os resultados encontrados com $N_e = 1000$ foram bastante satisfatórios, conforme é mostrado na Figura 4.2: obteve-se um sinal de velocidade com flutuações regulares – ou seja, sem intermitências (Figura 4.2a); uma função densidade de probabilidade próxima da distribuição normal, como é o esperado de resultados teóricos (Figura 4.2b); e uma distribuição relativamente homogênea dos vórtices ao longo da seção transversal (Figura 4.2c). É importante ressaltar que os resultados apresentados na Figura 4.2 são para um escoamento cuja velocidade principal é na direção x .

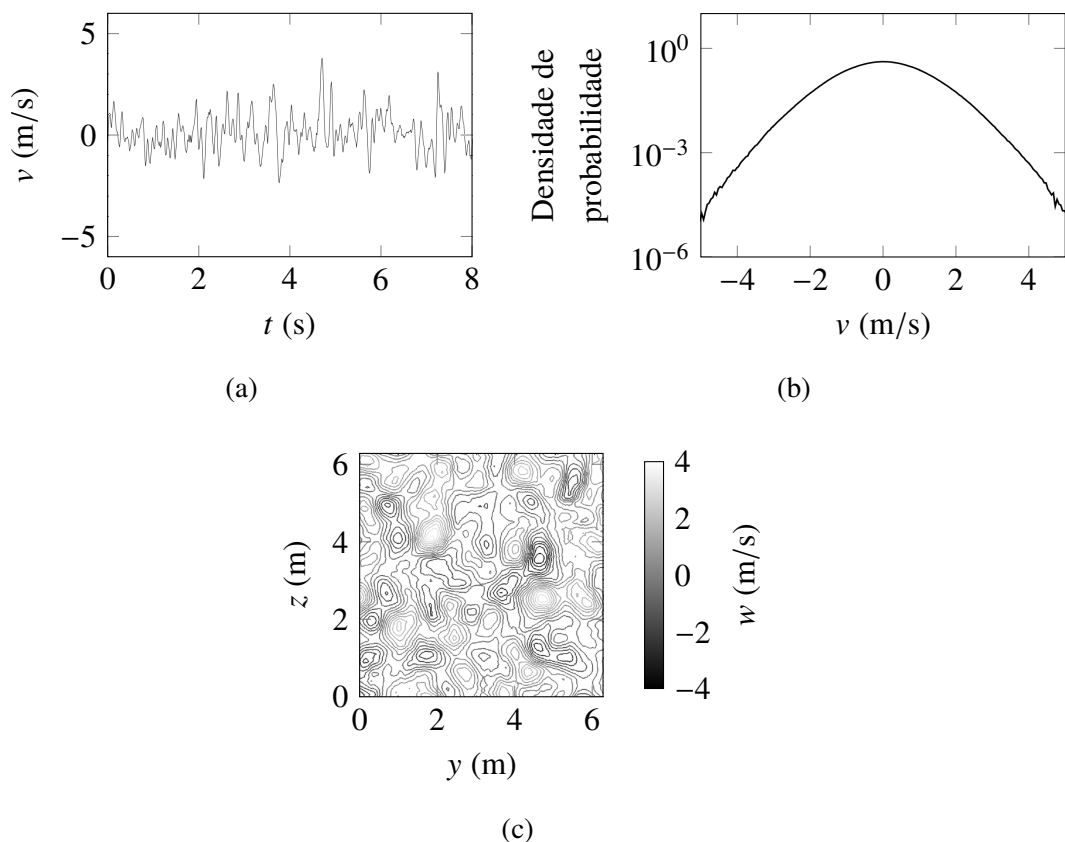


Figura 4.2 – Resultados obtidos por Jarrin, 2008, para $N_e = 1000$: sinal da componente de velocidade v com o tempo (a); função de densidade de probabilidade de v (b) e contornos da componente de velocidade w na seção transversal (c) [adaptado de Jarrin, 2008].

Para a atribuição de um valor para a escala de comprimento de vórtices L_e , definida anteriormente na Eq. (2.20), é necessário o conhecimento de três termos: $k^{3/2}/\epsilon$, $C_\kappa L$, e a dimensão máxima do volume computacional em uma das direções principais. Desses termos, $C_\kappa L$ é facilmente determinável *a priori*, uma vez que C_κ é uma constante e L é o comprimento característico associado à geometria do problema – no caso, adota-se o diâmetro hidráulico

como sendo igual a esse parâmetro. Similarmente, como a malha computacional é gerada antes do início da simulação e não se altera ao longo do cálculo numérico, o termo $\max(\delta x, \delta y, \delta z)$ também pode ser obtido sem dificuldades. Entretanto, embora se possa calcular a energia cinética turbulenta k a partir da intensidade de turbulência, não é possível determinar um valor para a taxa de dissipação viscosa ϵ sem um cálculo prévio. Por consequência, a definição acurada de L_e não pode ser feita sem dados de uma simulação anterior.

Portanto, para a determinação de L_e no presente trabalho, assume-se inicialmente que esse parâmetro é dado por $C_\kappa L = C_e D_h$, que, para a configuração geométrica considerada nas simulações, resulta em um comprimento $L_e = 0,1025$ m. Como a Eq. (2.20) é uma relação entre máximos e mínimos e $C_\kappa D_h$ é maior que as dimensões dos volumes da malha empregada, isso equivale à suposição de que a razão $k^{3/2}/\epsilon$ é maior que 0,1025 m.

Para verificar o valor prescrito para L_e , tanto a razão $k^{3/2}/\epsilon$ como o valor real da escala de comprimento dos vórtices, calculado pela Eq. (2.20), são reportados ao longo das simulações numéricas para cada caso. Como ilustração, a Figura 4.3 mostra resultados instantâneos para L_e (em $t = 15$ s) na seção transversal do duto, na primeira camada de volumes após a fronteira de entrada, de cálculos feitos com o dióxido de carbono, $IT = 10\%$ e usando o modelo WSGG. Nessa figura, percebe-se que L_e , apesar de não ser constante e uniforme em toda a seção transversal, não varia em uma faixa muito distante do seu valor assumido de 0,1025 m. Esse comportamento persiste ao longo do transiente das simulações e também é observado para o vapor de água.

Além disso, as variações de L_e são locais e instantâneas, isto é, as regiões em que o comprimento da escala dos vórtices é máximo ou mínimo se alteram com o passar do tempo. Contudo, o código numérico empregado permite apenas a prescrição de um valor único de L_e , uniforme sobre toda a seção transversal de entrada e constante no tempo.

Assim, após essa breve discussão, opta-se por impor $L_e = 0,1025$ m em todos os casos rodados nesta dissertação. Essa decisão é motivada por dois fatores: primeiro, pelo valor real de L_e , após rodada uma simulação, não ficar muito distante do valor prescrito; e, segundo, pelo fato de L_e , na condição de contorno do problema, ser imposto de maneira global (isto é, sobre toda a seção transversal), de forma que parece lógico que a definição desse parâmetro seja feita em termos de grandezas também globais do problema, tais como o diâmetro hidráulico.

4.1.4 Metodologia para a determinação da temperatura do reservatório de saída

A temperatura do reservatório após a seção de saída do duto, ou a temperatura na fronteira contida no plano $x = x_{max}$ do domínio computacional, é importante para o cálculo da condição de contorno de intensidade de radiação nessa superfície, conforme comentado na Seção 3.7.3. Contudo, embora seja necessário definir-se esse valor antes do início do cálculo, ele não é um dado de projeto como a temperatura do gás entrando no duto ou a temperatura das paredes.

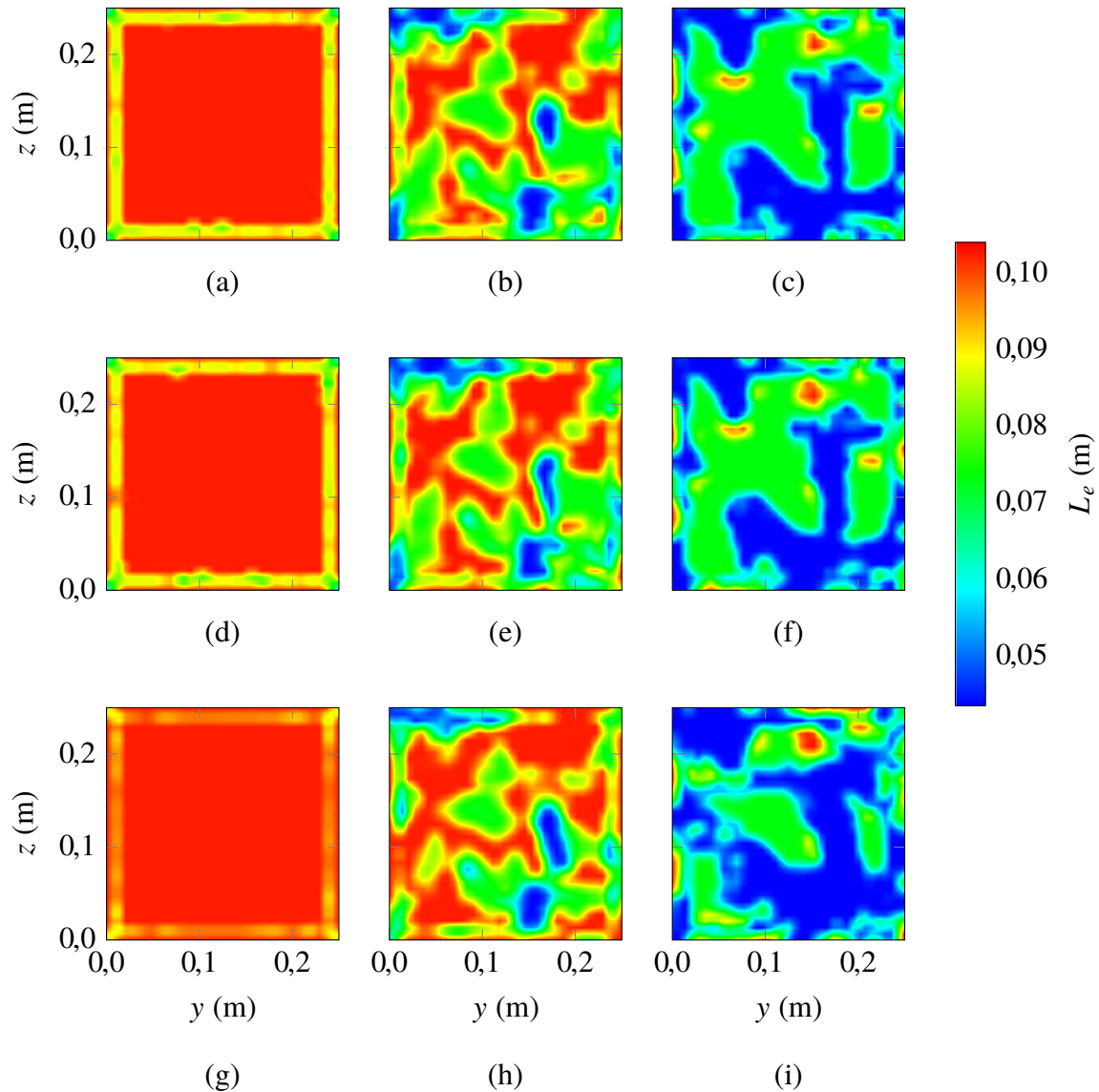


Figura 4.3 – Resultados para L_e na seção transversal dos volumes imediatamente posteriores à fronteira de entrada, para o CO_2 . Da esquerda para direita: IT igual a 0%, 10% e 20%; de cima para baixo: modelo GG com κ constante, modelo GG com $\kappa(T)$ e modelo WSGG.

Portanto, para a determinação da temperatura no reservatório de saída, T_∞ , emprega-se uma metodologia iterativa. Em cada caso considerado, simulações são conduzidas sucessivamente e o valor dessa temperatura é atualizado até a convergência. Para a primeira simulação do processo iterativo, adota-se para $T_{\infty,1}$ (onde o subscrito 1 indica um parâmetro para a primeira etapa de cálculo) a média entre a temperatura na entrada do escoamento, a temperatura das paredes e a temperatura inicial do fluido, resultando em $T_{\infty,1} = 733,33$ K. A atualização de T_∞ é feita com o valor da temperatura média de mistura, T_{med} , computada pela simulação precedente na camada de volumes vizinha à seção de saída.

A temperatura média de mistura é computada através da expressão [Bejan, 2004]

$$T_{med} = \frac{1}{u_{med}A} \int_A \langle u \rangle \langle T \rangle dA \quad (4.3)$$

onde A é a área de seção transversal e u_{med} é a velocidade média de mistura, dada por:

$$u_{med} = \frac{1}{A} \int_A \langle u \rangle dA \quad (4.4)$$

Quando a diferença relativa entre T_∞ em duas etapas consecutivas de cálculo (ou a diferença relativa entre T_∞ e T_{med} na mesma simulação) é menor que determinado valor ζ , supõe-se que o cálculo iterativo chegou à convergência e o processo é encerrado. Neste trabalho, emprega-se como critério de convergência $\zeta = 1 \times 10^{-3}$.

Por se tratar de uma análise LES feita em um domínio relativamente extenso, cada simulação numérica tem individualmente um custo computacional significativo. Portanto, como forma de reduzir o custo computacional do processo iterativo para a determinação de T_∞ , três níveis distintos de discretização são utilizados ao longo do procedimento de cálculo, chamados de “malha T1”, “malha T2” e “malha T3” na Tabela 4.2.

Tabela 4.2 – Parâmetros das malhas empregadas no processo iterativo para a determinação da temperatura do reservatório externo.

Parâmetros	Malha T1	Malha T2	Malha T3
Número de divisões na direção x	58	70	121
Número de divisões na direção y	17	20	36
Número de divisões na direção z	17	20	36
Número de volumes	16 762	28 000	156 816
Passo de tempo (s)	0,002	0,002	0,001
Tempo total de simulação (s)	15	20	20

Essas malhas são geradas seguindo-se a metodologia de discretização descrita na Seção 4.2. Conforme é mostrado na tabela, nas duas malhas mais grosseiras o passo de tempo adotado é maior, e, na malha T1, a simulação é encerrada 5 s antes da conclusão dos cálculos das demais malhas. Essas diferenças entre as malhas permitem reduzir o tempo de processamento das simulações individuais e o tempo total requerido para a convergência do processo iterativo.

As três malhas da Tabela 4.2 são usadas nas simulações numéricas do processo iterativo seguindo o esquema ilustrado na Figura 4.4. Na simulação inicial, com $T_{\infty,1} = 733,33$ K, a malha mais grosseira, T1, é empregada. No cálculo seguinte, em que T_∞ é atualizado com o valor de

T_{med} computado na simulação inicial, $T_{med,1}$, utiliza-se a malha T2. Finalmente, nas demais simulações, a malha mais refinada, T3, é utilizada. De modo geral, nos casos analisados neste trabalho, quatro iterações mostraram-se suficientes para atingir a convergência.

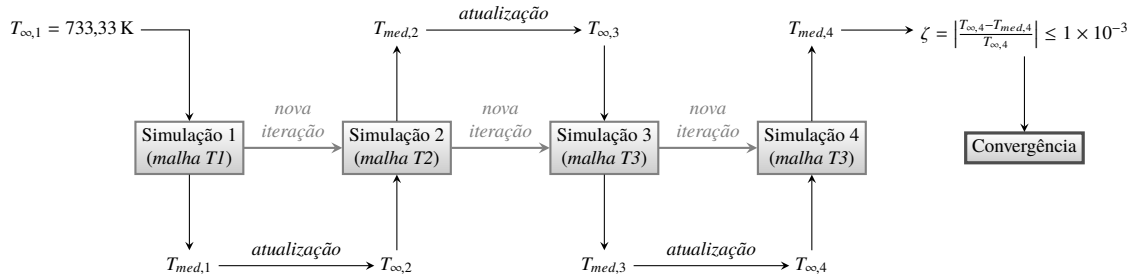


Figura 4.4 – Esquema da metodologia iterativa para a determinação da temperatura do reservatório de saída.

4.2 Discretização numérica

A estratégia de discretização numérica neste trabalho é similar à adotada por Velasco, 2014. O domínio de cálculo é dividido espacialmente em volumes hexaédricos retilíneos distribuídos de maneira uniforme – ou seja, possuindo todos o mesmo tamanho. Em todas as malhas geradas, tenta-se manter a razão de aspecto dos volumes (isto é, a razão entre seu comprimento, dimensão na direção x , e sua largura ou sua altura, dimensões nas direções y e z) o mais próximo de 3.

Quanto à discretização temporal, embora o FDS permita a atualização dinâmica do passo de tempo, ajustando o seu valor a cada iteração de modo a obter-se a faixa desejada do número de Courant modificado, esse recurso não é utilizado. Ao invés disso, adota-se um incremento de tempo constante ao longo de toda a simulação numérica, devido a limitações introduzidas pela incorporação ao código-base do FDS de modificações que permitem o cálculo de médias temporais de diversas grandezas, necessárias para a análise do TRI.

Finalmente, as simulações realizadas exigem também uma discretização angular em relação às direções pelas quais a intensidade de radiação se propaga, para a solução da RTE. Esta discretização é feita seguindo-se o procedimento descrito na Seção 3.7.1.

4.3 Análise da qualidade da discretização

Conforme comentado na Seção 4.2, as simulações conduzidas neste trabalho exigem a consideração de três tipos de discretização numérica: espacial, temporal e angular. Nas subseções seguintes, são apresentadas as análises realizadas para a escolha dos níveis mais adequados para cada uma dessas discretizações.

Essas análises são feitas a partir da comparação de resultados de determinados parâmetros obtidos com diferentes níveis de discretização. Os parâmetros são as médias temporais da taxa total de transferência de calor para as paredes do duto por radiação, $\langle q_{r,w} \rangle$, e por radiação e convecção, $\langle q_{t,w} \rangle$, e as médias temporais da temperatura e do termo fonte radiativo, $\langle T \rangle$ e $\langle S_r \rangle$, respectivamente.

Os valores da temperatura e do termo fonte radiativo, por essas serem grandezas locais, são tomados em cinco pontos dentro do domínio computacional. Todos os pontos estão contidos no plano médio longitudinal do duto ($z = 0,25$ m) e distribuídos ao longo de duas linhas, conforme esquematizado na Figura 4.5. Na linha $(y, z) = (0,25$ m, $0,25$ m), o ponto x2.5 está localizado a 5 diâmetros hidráulicos (ou seja, 2,5 m) da entrada do domínio; o ponto x3.5, a $7D_h$ da entrada (3,5 m); e o ponto x5.0, a $10D_h$ (5 m). Na linha $(x, z) = (5$ m, $0,25$ m), os pontos y0.125 e y0.0625 estão posicionados em um quarto e um oitavo da altura do duto, ou 0,125 m e 0,0625 m da superfície inferior do domínio, respectivamente.

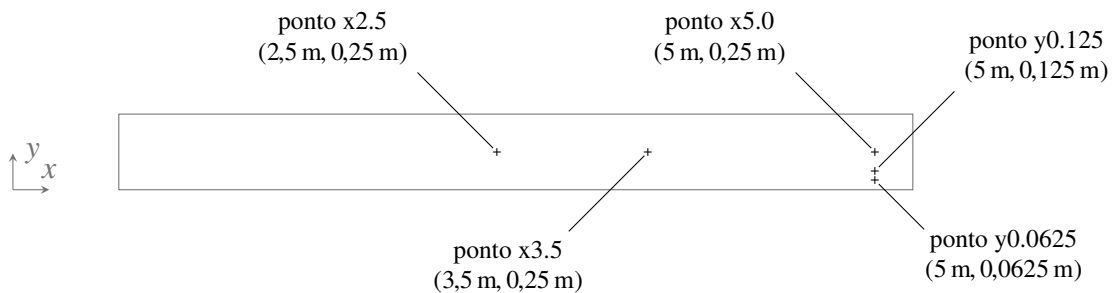


Figura 4.5 – Pontos utilizados na análise da qualidade da discretização numérica, mostrados na seção longitudinal média do duto, correspondente ao plano $z = 0,25$ m.

Em todos os casos, o tempo total de simulação é de 20 s e as médias de $q_{t,w}$, $q_{r,w}$, T e S_r são computadas de dados tomados a partir dos 5 s de cálculo. Uma discussão sobre a definição do intervalo de tempo para o cálculo das médias temporais das grandezas é feita no Apêndice A.

4.3.1 Discretização espacial

A definição de um nível de discretização espacial que forneça resolução suficiente das escalas da turbulência em LES não é uma tarefa fácil. Nessa metodologia, a independência de malha – ou seja, a malha cujos resultados não mais sejam influenciados pelo seu nível de refinamento – não é possível de ser atingida, pois a discretização que cumprisse tal requisito seria na verdade uma malha apropriada para a simulação numérica direta [Speziale, 1998; Celik, 2005]. Em geral, o que é feito em estudos LES (por exemplo, em Velasco, 2014) é procurar, através do refino sistemático da malha espacial, um nível de discretização para o qual os valores médios relevantes estabilizem-se. Além disso, critérios como a medida de resolução

da turbulência, introduzido na Seção 2.3.5, permitem uma avaliação *a posteriori* da qualidade da discretização. Os resultados obtidos com a análise deste critério são apresentados na Seção 4.3.4, enquanto na presente subseção é feita a comparação entre resultados médios de temperatura e termo fonte computados com diferentes níveis de discretização espacial.

Para essa comparação, sete malhas são geradas, seguindo-se o procedimento descrito na Seção 4.2. Cada malha possui um nível de refinamento distinto, que é obtido através do aumento progressivo do número de divisões do domínio computacional nas direções x , y e z , tentando-se manter sempre a razão de refinamento, definida na Eq. (4.5) [Roache, 1994], constante em 1,2.

$$r_m = \left(\frac{N_{m+1}}{N_m} \right)^{1/Dim} \quad (4.5)$$

Na Eq. (4.5), N_m e N_{m+1} são os números de volumes das malhas m e $m + 1$, respectivamente, e o índice $m + 1$ representa uma malha imediatamente mais fina que a malha m . Dim é a dimensão do problema – no caso, para o problema tridimensional analisado, $Dim = 3$. A Tabela 4.3 apresenta a denominação de todas as malhas empregadas para a análise da qualidade da discretização espacial, juntamente com os seus números de volumes e razões de refinamento.

Tabela 4.3 – Parâmetros das malhas empregadas na análise da qualidade da discretização espacial.

Malha	Número de divisões			Número de volumes	r_m
	Em x	Em y	Em z		
Q _x 1	58	17	17	16 762	1,187
Q _x 2	70	20	20	28 000	1,200
Q _x 3	84	24	24	48 384	1,206
Q _x 4	101	29	29	84 941	1,227
Q _x 5	121	36	36	156 816	1,207
Q _x 6	149	43	43	275 501	1,213
Q _x 7	182	52	52	492 128	-

Cada malha é simulada utilizando-se a geometria e as condições de contorno descritas na Seção 4.1. Quanto às discretizações temporal e angular, adota-se um passo de tempo de 5×10^{-4} s e 100 ângulos de controle para a solução da RTE. Os cálculos numéricos são conduzidos apenas para o vapor de água e para a intensidade de turbulência na entrada do escoamento igual a 10 %; assume-se que a análise de qualidade de malha realizada com esses parâmetros pode ser extrapolada para o dióxido de carbono e para as demais intensidades de turbulência – ou seja, a discretização espacial escolhida é empregada nas simulações de todos os casos do presente

trabalho. O procedimento de avaliar a qualidade de malha para somente um dentre os diferentes conjuntos de condições de contorno do problema é usual em estudos numéricos (por exemplo, Centeno, 2014, e Velasco, 2014), e a mesma ideia é adotada para as análises da qualidade da discretização temporal e da discretização angular, descritas nas próximas seções.

Os resultados obtidos em cada ponto e com cada malha para a temperatura média e para o termo fonte radiativo médio são apresentados na Figura 4.6. Dessa figura, embora seja possível perceber nos cinco pontos considerados uma menor variação dos resultados para discretizações mais finas (isto é, com maior número de volumes), nenhuma conclusão é evidente.

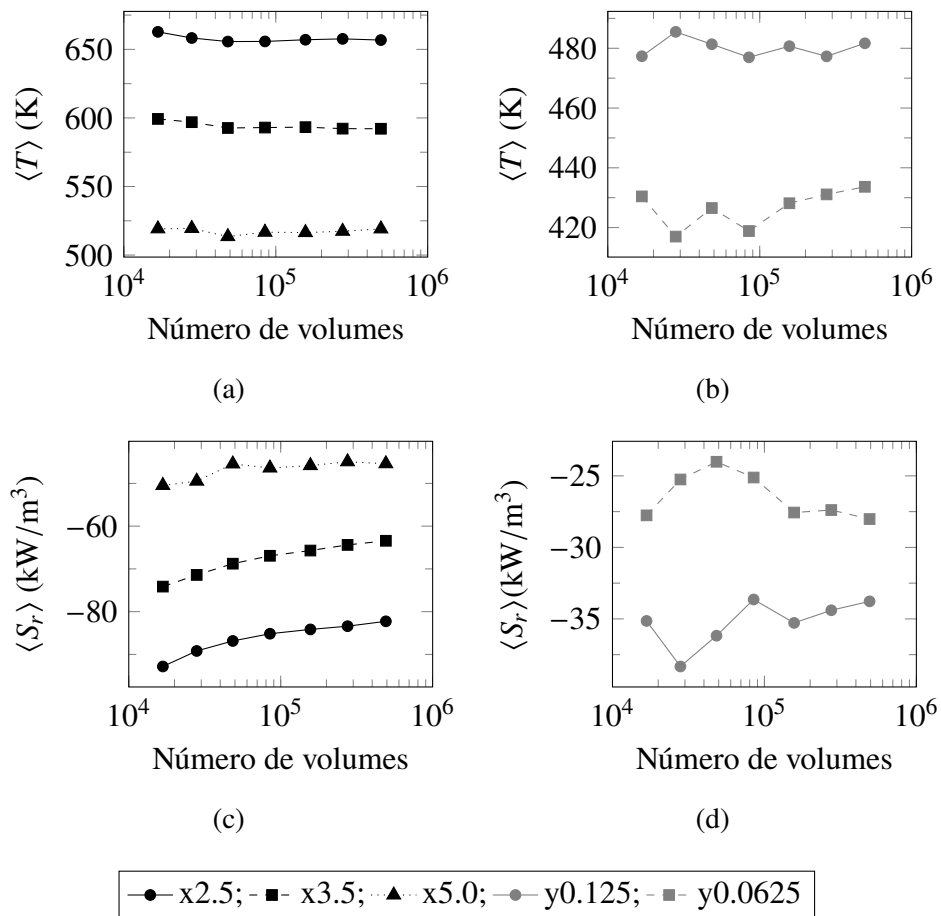


Figura 4.6 – Resultados para a temperatura média, (a) e (b), e para o termo fonte radiativo médio, (c) e (d), obtidos na análise da qualidade da discretização espacial.

Uma melhor compreensão dos resultados pode ser atingida através de comparações entre eles. Com esse fim, as Tabelas 4.4 e 4.5 mostram, respectivamente, diferenças percentuais entre resultados encontrados com duas malhas sucessivas e diferenças percentuais entre o resultado encontrado com cada malha e o resultado da discretização espacial mais refinada (malha $Q_x 7$). As

diferenças percentuais ψ apresentadas nestas tabelas são calculadas como

$$\psi = \left| \frac{\phi_m - \phi_{ref}}{\phi_{ref}} \right| \times 100 \quad (4.6)$$

onde $\phi_{ref} = \phi_{m+1}$ na Tabela 4.4 e $\phi_{ref} = \phi_{Qx7}$ na Tabela 4.5.

Tabela 4.4 – Diferenças percentuais dos resultados médios de temperatura e de termo fonte radiativo em relação à malha espacial imediatamente mais refinada.

Parâmetro	Ponto	Q _{x1}	Q _{x2}	Q _{x3}	Q _{x4}	Q _{x5}	Q _{x6}
$\langle T \rangle$ (K)	x2.5	0,6790	0,3961	0,0130	0,1882	0,0967	0,1319
	x3.5	0,3978	0,7141	0,0521	0,0500	0,1837	0,0137
	x5.0	0,0530	1,1577	0,6174	0,0507	0,1859	0,3305
	y0.125	1,6792	0,8616	0,9170	0,7748	0,7110	0,9070
	y0.0625	3,2266	2,2405	1,8374	2,1713	0,6867	0,5865
$\langle S_r \rangle$ (W/m ³)	x2.5	4,0716	2,6956	1,9835	1,1999	0,9041	1,3870
	x3.5	3,8227	3,8207	2,7644	1,8630	2,0459	1,5240
	x5.0	2,0297	8,8523	2,0476	1,2237	1,9954	1,0118
	y0.0125	8,3085	5,9499	7,5305	4,6467	2,5748	1,8407
	y0.0625	9,9369	5,1540	4,3834	8,8790	0,6308	2,2442

Tabela 4.5 – Diferenças percentuais dos resultados médios de temperatura e de termo fonte radiativo em relação à malha mais refinada (malha Q_{x7}).

Parâmetro	Ponto	Q _{x1}	Q _{x2}	Q _{x3}	Q _{x4}	Q _{x5}	Q _{x6}
$\langle T \rangle$ (K)	x2.5	0,9098	0,2293	0,1661	0,1532	0,0350	0,1319
	x3.5	1,2109	0,8099	0,0951	0,1473	0,1974	0,0137
	x5.0	0,0122	0,0652	1,0799	0,4654	0,5158	0,3305
	y0.125	0,8992	0,7934	0,0676	0,9757	0,2025	0,9070
	y0.0625	0,7395	3,8422	1,6383	3,4130	1,2692	0,5865
$\langle S_r \rangle$ (W/m ³)	x2.5	12,8456	8,4308	5,5847	3,5312	2,3036	1,3870
	x3.5	16,8960	12,5920	8,4485	5,5312	3,6011	1,5240
	x5.0	11,1797	8,9680	0,1063	2,1989	0,9634	1,0118
	y0.125	4,0540	13,4827	7,1098	0,3912	4,4629	1,8407
	y0.0625	0,9181	9,8738	14,2912	10,3620	1,6275	2,2442

Das Tabelas 4.4 e 4.5, percebe-se que a diferença relativa para a temperatura média, tanto em relação à malha posterior como em relação à malha Q_x7 é menor que 1 % em todos os pontos, a partir da malha Q_x4 . Para o termo fonte radiativo médio, no entanto, essa diferença não é inferior a 1 % mesmo na segunda discretização mais fina. Diferenças de menos de 5 % nessa grandeza são observadas apenas a partir da malha Q_x5 .

Ao avaliar as diferenças percentuais dos resultados entre os níveis de discretização, é importante observar que o objetivo do presente trabalho é analisar a interação turbulência-radiação no escoamento como um todo no interior do duto. Essa análise é feita através de uma comparação entre dois tipos de simulação realizadas em uma mesma malha computacional, conforme é detalhado na Seção 4.4. Portanto, embora desejada, a obtenção de um comportamento detalhado e exato do escoamento não é essencial para os fins desta dissertação, especialmente quando se tem o contraponto do esforço computacional requerido para a simulação das malhas mais finas (que é naturalmente alto pela natureza do problema LES acoplado com radiação que está sendo resolvido). Assim, sob essa ótica, julga-se que diferenças locais de cerca de 5 % em $\langle S_r \rangle$ são aceitáveis.

Além disso, deve-se ressaltar que Tabelas 4.4 e 4.5 apresentam comparações baseadas em valores pontuais de temperatura e termo fonte radiativo. Na análise de grandezas globais do problema, como as médias temporais da taxa total de calor transferido para as paredes do duto por radiação e por radiação e convecção, diferenças entre níveis de discretização distintos são menores. Isso pode ser constatado na Tabela 4.6, que mostra os valores de $\langle q_{r,w} \rangle$ e $\langle q_{t,w} \rangle$ obtidos com cada malha e as diferenças entre esses parâmetros quando computados com dois níveis de discretização sucessivos.

Tabela 4.6 – Taxas médias de transferência de calor para as paredes (por radiação e total) obtidas com os diferentes níveis de discretização espacial e diferenças percentuais dos resultados em relação à malha imediatamente mais refinada.

Malha	Resultados (kW)		Diferenças (%)	
	$q_{r,w}$	$q_{t,w}$	$\psi_{q_{r,w}}$	$\psi_{q_{t,w}}$
Q_x1	31,530	38,345	0,7913	0,0503
Q_x2	31,779	38,365	0,8265	0,0765
Q_x3	32,042	38,394	0,7875	0,0271
Q_x4	32,294	38,384	0,8210	0,1362
Q_x5	32,559	38,331	0,6615	0,0931
Q_x6	32,774	38,296	0,6935	0,1938
Q_x7	33,002	38,221	-	-

Dessa tabela, tem-se que mesmo a malha mais grosseira apresenta erros menores que 1 %

para a taxa de calor transferido por radiação e inferiores a 0,1 % para a taxa líquida de calor. Esses são valores muito razoáveis para o estudo que é feito no presente trabalho e mostram que mesmo níveis de discretização espacial não tão finos são capazes de prover resultados aceitáveis com base em grandezas globais.

Uma discussão sobre o tempo necessário para o processamento de cada malha é difícil de ser feita no presente trabalho, pois diferentes máquinas, com poderes de computação muito variados, são empregadas para realizar as simulações. Comparando-se apenas os resultados obtidos em um mesmo computador, tem-se, por exemplo, que o cálculo da malha mais grosseira, Q_x1, exigiu aproximadamente 4,6 h, enquanto para a computação da malha mais fina, Q_x7, são necessárias 154,7 h.

Portanto, ponderando-se os argumentos expostos nos parágrafos anteriores, opta-se pela malha Q_x5 para a discretização espacial do domínio em todos os demais casos simulados. Para grandezas globais do problema, como as taxas totais de transferência de calor para as paredes do duto, essa malha apresenta resultados muito bons, com diferenças em relação ao nível de discretização imediatamente mais fino de aproximadamente de 0,05 % para $\langle q_{r,w} \rangle$ e de cerca de 0,01 % para $\langle q_{t,w} \rangle$. Em termos da temperatura média local, os resultados da malha Q_x5 também são bastante aceitáveis, mostrando desvios inferiores a 1 %; quanto ao termo fonte radiativo médio local, as diferenças não excedem 5 %, um valor razoável para os fins deste trabalho. O tempo de processamento para esse nível de discretização, com a mesma máquina utilizada para simular as malhas Q_x1 e Q_x7, é de 59,9 h.

4.3.2 Discretização temporal

Uma vez definido o nível de discretização espacial adequado, a malha Q_x5 é utilizada para a realização de uma nova série de simulações transientes, cada uma adotando um passo de tempo distinto. São considerados os seguintes valores de incremento temporal: $\delta t = 8 \times 10^{-3}$ s, cujo caso é denominado Q_t1; $\delta t = 4 \times 10^{-3}$ s, chamado Q_t2; $\delta t = 2 \times 10^{-3}$ s, Q_t3; $\delta t = 1 \times 10^{-3}$ s, Q_t4; $\delta t = 5 \times 10^{-4}$ s, Q_t5; e $\delta t = 2,5 \times 10^{-4}$ s, Q_t6.

Seguindo o mesmo procedimento adotado na subseção anterior, os seis casos listados são simulados no mesmo domínio de cálculo e com as mesmas condições de contorno, descritas na Seção 4.1. Para a discretização angular, são considerados 100 ângulos de controle. Os resultados médios obtidos para a temperatura e o termo fonte radiativo são mostrados na Figura 4.7, e as diferenças percentuais dessas grandezas computadas com dois níveis de discretização sucessivos são dados na Tabela 4.7. A comparação dos resultados de cada nível de discretização temporal com o caso Q_t6 não é apresentada aqui por questão de brevidade. Além disso, na Figura 4.7 e na Tabela 4.7, são omitidos os resultados correspondentes aos dois maiores incrementos de tempo ($\delta t = 8 \times 10^{-3}$ s e $\delta t = 4 \times 10^{-3}$ s), porque nesses casos o cálculo numérico divergiu, provavelmente devido ao fato de o passo de tempo adotado ser muito elevado para a discretização espacial utilizada.

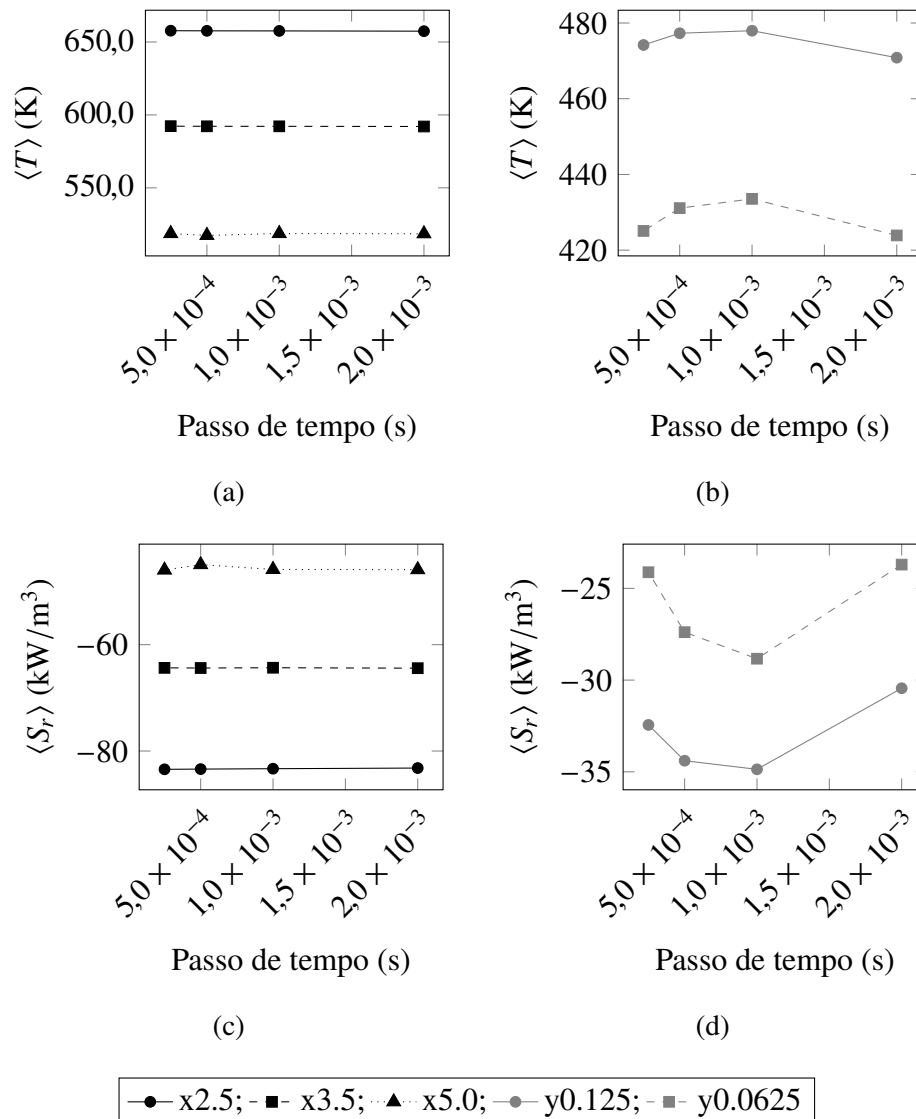


Figura 4.7 – Resultados para a temperatura média, (a) e (b), e para o termo fonte radiativo médio, (c) e (d), obtidos na análise da qualidade da discretização temporal.

Da análise da figura e da tabela, percebe-se um comportamento um tanto errático de $\langle T \rangle$ e especialmente de $\langle S_r \rangle$ nas proximidades da parede, isto é, nos pontos $y0.125$ e $y0.0625$. Nessas localidades, tem-se altas variações de temperatura média e termo fonte radiativo médio com o refino da discretização espacial, observando-se inclusive o aumento da diferença percentual dada na Tabela 4.7 para menores passos de tempo. Por outro lado, no núcleo do escoamento (nos pontos ao longo da linha $y = 0,25$ m), diferenças de cerca de 1 % são encontradas mesmo para a discretização Q_t3 .

A Tabela 4.8 apresenta uma comparação dos valores médios das taxas totais de calor transferido para as paredes por radiação e por radiação e convecção obtidos com cada passo de tempo. Mesmo com o maior incremento de tempo para o qual o cálculo numérico não divergiu,

Tabela 4.7 – Diferenças percentuais dos resultados médios de temperatura e de termo fonte radiativo em relação ao passo de tempo imediatamente mais refinado.

Parâmetro	Ponto	Q _t 3	Q _t 4	Q _t 5
$\langle T \rangle$ (K)	x2.5	0,0273	0,0086	0,0128
	x3.5	0,0211	0,0026	0,0141
	x5.0	0,0309	0,2503	0,2462
	y0.125	1,4890	0,1392	0,6537
	y0.0625	2,2277	0,5677	1,4162
$\langle S_r \rangle$ (W/m ³)	x2.5	0,1441	0,0897	0,0504
	x3.5	0,1296	0,0796	0,0461
	x5.0	0,0822	2,0342	2,2327
	y0.125	12,6755	1,3612	6,0161
	y0.0625	17,7869	5,2735	13,5461

a diferença dos resultados (tanto de $\langle q_{r,w} \rangle$ como de $\langle q_{t,w} \rangle$) em relação àqueles obtidos com a discretização temporal imediatamente mais fina é menor que 0,1 %, um valor aceitável para o que é proposto nesta dissertação.

Tabela 4.8 – Taxas médias de transferência de calor para as paredes (por radiação e total) obtidas com os diferentes níveis de discretização temporal e diferenças percentuais dos resultados em relação à malha imediatamente mais refinada.

Malha	Resultados (kW)		Diferenças (%)	
	$q_{r,w}$	$q_{t,w}$	$\psi_{q_{r,w}}$	$\psi_{q_{t,w}}$
Q _t 3	32,787	38,304	0,0207	0,0378
Q _t 4	32,780	38,289	0,0175	0,0170
Q _t 5	32,774	38,296	0,0175	0,0309
Q _t 6	32,769	38,284	-	-

Quanto ao tempo de processamento das simulações, este aumenta de forma quase linear com o refino do passo de tempo. Por exemplo, com o incremento de tempo Q_t5, que equivale ao caso Q_x5 da subseção anterior, o cálculo numérico leva 59,9 h, conforme já reportado; por outro lado, o processamento da discretização Q_t4 com a mesma máquina requer aproximadamente a metade desse tempo, 30,8 h.

Portanto, adota-se o passo de tempo $\delta t = 1 \times 10^{-3}$ s (correspondente à discretização temporal Q_t4) para as simulações dos casos principais do presente trabalho. Os cálculos preliminares para a determinação da temperatura de saída (malhas T1 e T2) utilizam passos de tempo maiores

como forma de reduzir o tempo computacional, conforme comentado na Seção 4.1.4. Quando comparada à Q_t5 , a discretização Q_t4 apresenta diferenças menores que 1 % para a temperatura média nos cinco pontos analisados; para o termo fonte radiativo, as diferenças também são dessa magnitude no núcleo do escoamento, e são de aproximadamente 5 % no ponto mais próximo da parede; por fim, na avaliação das taxas de calor transferido para as paredes do duto, os desvios encontrados com a discretização Q_t4 são inferiores a 0,05 %.

4.3.3 Discretização angular

Seguindo os mesmos procedimentos descritos nas subseções anteriores, a análise da discretização angular para a solução da RTE é feita através da simulação de uma série de casos em que o número de divisões da esfera unitária ao redor de cada volume é progressivamente aumentado. Quanto à geometria e às condições de contorno do problema, novamente emprega-se aquelas apresentadas na Seção 4.1. A malha computacional utilizada é a Q_x5 , da Tabela 4.3, e o passo de tempo adotado é $\delta t = 1 \times 10^{-3}$ s, correspondente à malha temporal Q_t4 .

Cinco níveis distintos de discretização angular são considerados. Na discretização mais grosseira, denominada $Q_\Omega1$, a esfera unitária é dividida em 25 ângulos de controle; na discretização seguinte, $Q_\Omega2$, são usados 50 ângulos de controle; em $Q_\Omega3$, 100; em $Q_\Omega4$, 200; e, finalmente, em $Q_\Omega5$, 400. Os resultados de temperatura e termo fonte radiativo são mostrados na Figura 4.8 e na Tabela 4.9, enquanto a Tabela 4.10 apresenta os resultados encontrados para as taxas totais médias de calor transferidos para as paredes.

Tabela 4.9 – Diferenças percentuais dos resultados médios de temperatura e de termo fonte radiativo em relação à discretização angular imediatamente mais fina.

Parâmetros	$Q_\Omega1$	$Q_\Omega2$	$Q_\Omega3$	$Q_\Omega4$	
$\langle T \rangle$ (K)	x2.5	0,4524	0,1827	0,1087	0,0443
	x3.5	0,4967	0,1951	0,1215	0,0310
	x5.0	0,4448	0,3060	0,2840	0,1854
	y0.125	0,3492	1,3225	0,3098	1,3338
	y0.0625	0,0999	1,3439	0,6642	0,2648
$\langle S_r \rangle$ (W/m ³)	x2.5	0,2558	0,0910	0,0392	0,0831
	x3.5	0,3562	0,0794	0,1346	0,0535
	x5.0	1,2555	1,2055	1,0864	1,3109
	y0.125	0,8494	10,4912	4,3507	11,1868
	y0.0625	1,5485	6,7791	6,6816	1,5517

Os mesmo critérios adotados nas análises da discretização espacial e da discretização

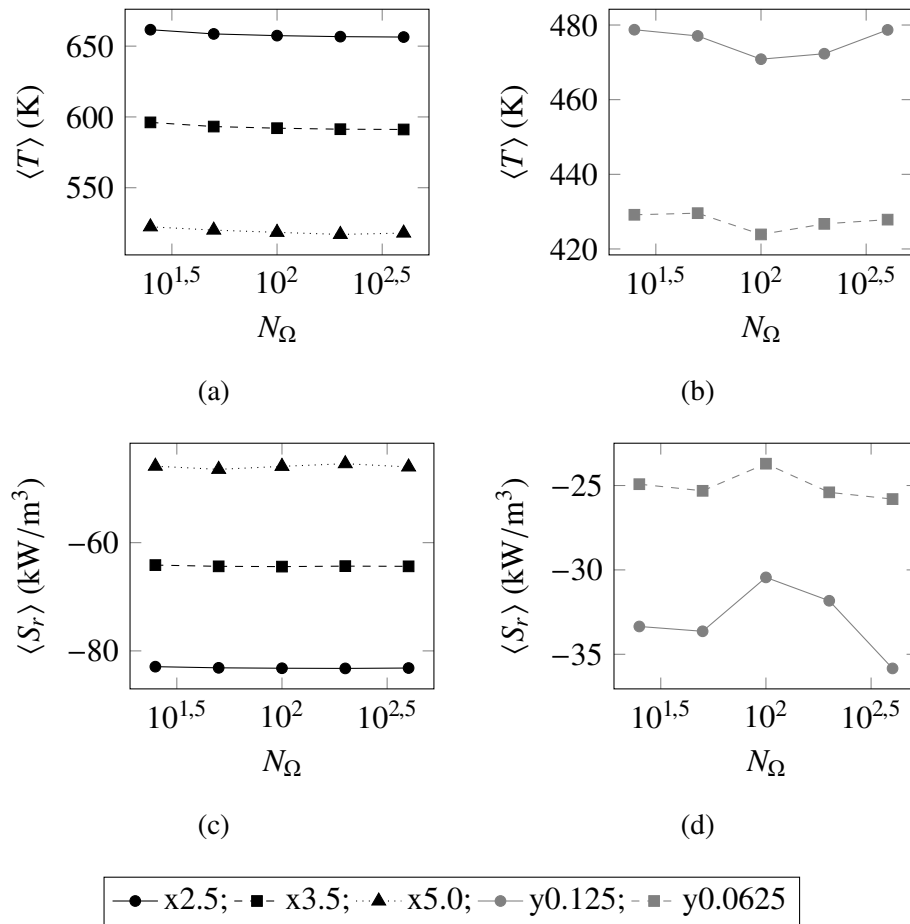


Figura 4.8 – Resultados para a temperatura média, (a) e (b), e para o termo fonte radiativo médio, (c) e (d), obtidos na análise da qualidade da discretização angular.

Tabela 4.10 – Taxas médias de transferência de calor para as paredes (por radiação e total) obtidas com os diferentes níveis de discretização angular e diferenças percentuais dos resultados em relação à malha imediatamente mais refinada.

Malha	Resultados (kW)		Diferenças (%)	
	$q_{r,w}$	$q_{t,w}$	$\psi_{q_{r,w}}$	$\psi_{q_{t,w}}$
$Q_\Omega 1$	32,697	38,224	0,2110	0,1589
$Q_\Omega 2$	32,766	38,285	0,0270	0,0285
$Q_\Omega 3$	32,774	38,296	0,1047	0,0838
$Q_\Omega 4$	32,809	38,328	0,0093	0,0203
$Q_\Omega 5$	32,812	38,320	-	-

temporal são empregados nesta seção. Ou seja, busca-se o número de ângulos de controle que forneça diferenças percentuais inferiores a 1 % para $\langle T \rangle$ em todos os pontos e diferenças dessa

magnitude para $\langle S_r \rangle$ no núcleo do escoamento; nas proximidades da parede, é desejável que os desvios do termo fonte radiativo médio fiquem em torno de 5%. Quanto a $\langle q_{r,w} \rangle$ e $\langle q_{t,w} \rangle$, conforme pode ser verificado na Tabela 4.10, mesmo a discretização mais grosseira resulta em desvios de menos de 0,5%, e, com malhas angular mais finas, essa diferença é ainda mais reduzida. Como discutido anteriormente, valores dessa magnitude para as taxas de transferência de calor superficial são bastante satisfatórios.

Portanto, escolhe-se a discretização angular $Q_{\Omega 3}$ para a simulação dos casos principais desta dissertação, na qual a esfera unitária é dividida em 100 ângulos de controle. Por ser idêntica ao caso Q_{t4} , introduzido na Seção 4.3.2, seu tempo de processamento também é de 30,8 h; como referência, a simulação da discretização angular mais fina, Q_{t6} , exigiu 136,7 h para a sua conclusão no mesmo computador.

4.3.4 Critério de Courant-Friedrichs-Lewy e medida da resolução de turbulência

Concluída a análise da qualidade das discretizações espacial, temporal e angular, tem-se definido os níveis de cada discretização assumidos como apropriados para utilização nas simulações do presente trabalho. No entanto, adicionalmente às análises *a priori* (isto é, análises realizadas antes das simulações computacionais) apresentadas nesta seção, toma-se o cuidado de se verificar, após o cálculo numérico de cada caso, o critério de estabilidade numérica reportado pelo FDS – o critério de Courant-Friedrichs-Lewy modificado, explicado na Seção 3.8 – e a medida da fração do escoamento turbulento que é resolvido diretamente pela malha espacial, avaliada pela média temporal do critério MTR, introduzido na Seção 2.3.5. Com o objetivo de deixar o texto mais fluido, ao invés de serem apresentados no Capítulo 5, os valores desses parâmetros são discutidos nesta subseção.

A Tabela B.1, no Apêndice B, fornece informações sobre o máximo número de Courant modificado encontrado em cada uma das simulações realizadas nesta dissertação (com exceção das simulações para a análise da qualidade de malha). Observa-se que os valores de C_{mod} nunca excedem 0,2, ficando na maioria dos casos em menos de 0,1, muito abaixo da restrição imposta pelo critério CFL para a estabilidade numérica, de $C_{mod} \leq 1$ [McGrattan et al., 2015b].

Na Tabela B.1, também são mostrados, para cada caso computado, os valores máximos do critério M de Pope, 2004, em todo o domínio, estimado como a média temporal da medida de resolução da turbulência tomada sobre toda a duração da simulação numérica. Percebe-se que, em geral, o valor máximo de $\langle MTR \rangle$ no domínio de cálculo é inferior ou igual ao maior valor recomendado para LES por Pope, 2004, e pelo guia de referência técnico do FDS [McGrattan et al., 2015b], de 0,2.

As exceções são em alguns cálculos com $IT = 0\%$, nos quais se encontram valores máximos de até 0,5. Isso é ilustrado na Figura 4.9, que mostra a distribuição da média temporal do critério MTR sobre o plano longitudinal médio para os casos considerados nesta dissertação com intensidade de turbulência nula. Dessa figura, no entanto, percebe-se que $\langle MTR \rangle$ fica acima

da faixa apropriada apenas na vizinhança da seção de entrada. Essa é a região em que são gerados os vórtices sintéticos na condição de contorno turbulenta do SEM. Possivelmente, o alto valor da medida de resolução da turbulência nessa localidade se deve ao fato de os vórtices sintetizados possuírem elevada energia cinética turbulenta na escala submalha, o que resulta em altos valores de $\langle MTR \rangle$.

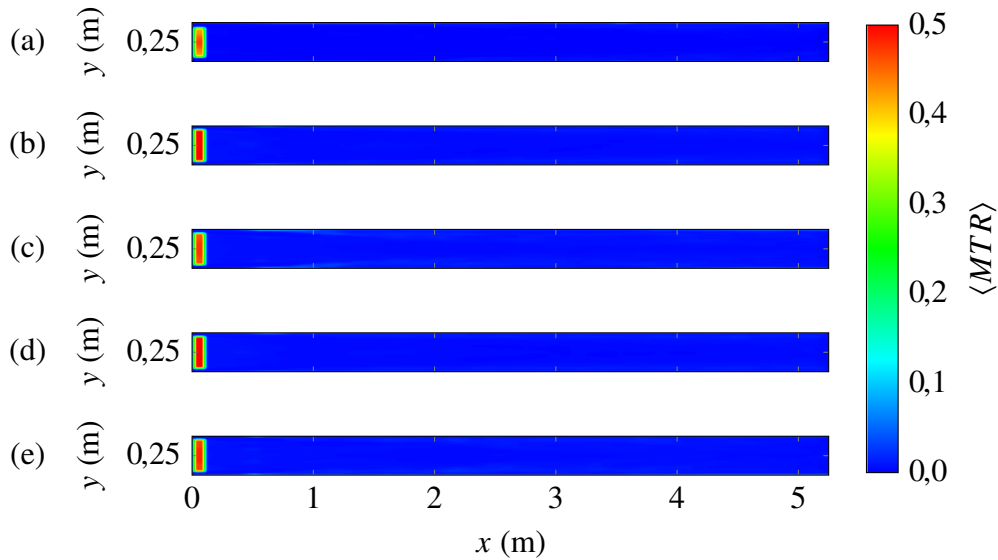


Figura 4.9 – Média temporal do critério MTR no plano longitudinal médio do duto, com $IT = 0\%$. CO_2 (a, c, e) e H_2O (b, d) como gases participantes; modelo espectral WSGG (a), modelo GG com κ função da temperatura local (b, c) e modelo GG com κ constante (d, e).

Porém, como esse comportamento se restringe ao comprimento inicial do duto e o restante do domínio computacional apresenta $\langle MTR \rangle \leq 0,2$, opta-se por não adotar uma malha mais refinada para a solução desses casos. Tal decisão é tomada principalmente porque o uso de uma discretização espacial mais fina aumentaria de forma considerável o tempo de processamento, uma vez que, em geral, os cálculos com $IT = 0\%$ já exigem a adoção de passos de tempo menores que os utilizados nas demais simulações, como é discutido no Apêndice B.

4.4 Metodologia para a análise do TRI

Nesta dissertação, a magnitude das contribuições da interação turbulência-radiação sobre cada um dos casos estudados é avaliada através de diferenças entre certos parâmetros médios obtidos nas simulações que incluem o TRI e que o desconsideram; quanto maiores são essas diferenças, assume-se que maior é o efeito do fenômeno sobre o problema. Para serem utilizadas nessas comparações, escolhem-se grandezas características do processo de transferência de calor por radiação, isto é, as médias temporais dos fluxos de calor nas paredes do duto – tanto por radiação, $\langle q''_{r,w} \rangle$, como por convecção, $\langle q''_{c,w} \rangle$ – e o termo fonte radiativo médio dentro de todo o

domínio computacional, $\langle S_r \rangle$.

Em estudos sobre o TRI, a análise baseada em diferenças percentuais entre cálculos que consideram e que negligenciam o fenômeno é bastante comum, especialmente no contexto da modelagem LES – por exemplo, nos trabalhos de Gupta et al., 2009, Malalasekera et al., 2009, Poitou et al., 2012, Gupta et al., 2013, e Velasco, 2014. Entretanto, ao adotar-se essa abordagem, duas importantes questões precisam ser definidas: a primeira diz respeito à metodologia com a qual são determinadas as soluções “com TRI” e “sem TRI” a partir dos recursos numéricos disponíveis; e a segunda é a maneira como são calculadas as diferenças percentuais entre essas soluções.

4.4.1 Forma de obtenção dos resultados “com TRI” e “sem TRI”

Os fluxos de calor e o termo fonte radiativo “com TRI” são determinados pelo pós-processamento das simulações transientes realizadas com a modelagem LES. Desses cálculos, tem-se dados instantâneos a partir dos quais são feitas médias temporais compreendendo os últimos 15 s das simulações numéricas, obtendo-se assim $\langle q''_{r,w} \rangle_{TRI}$, $\langle q''_{c,w} \rangle_{TRI}$ e $\langle S_r \rangle_{TRI}$. O procedimento adotado para a definição do período de tempo apropriado para o cálculo das médias é descrito no Apêndice A.

A determinação dessas mesmas quantidades para a solução “sem TRI” é mais complexa, uma vez que o FDS não permite executar simulações empregando a modelagem clássica da turbulência (abordagem RANS, introduzida na Seção 2.2.2). Neste trabalho, então, utiliza-se uma abordagem similar à empregada por Malalasekera et al., 2009, Poitou et al., 2012, e Velasco, 2014: campos médios são calculados dos resultados instantâneos da simulação transiente e usados para inicializar um novo cálculo numérico independente, cuja duração é de um único passo de tempo. A partir desse cálculo, chega-se aos valores das grandezas de interesse, que são assumidos como sendo os resultados da solução “sem TRI” – ou seja, $\langle q''_{r,w} \rangle_{nTRI}$, $\langle q''_{c,w} \rangle_{nTRI}$ e $\langle S_r \rangle_{nTRI}$.

Tradicionalmente, quando essa metodologia é empregada, a inicialização do cálculo “sem TRI” é feita com os campos médios da temperatura e das concentrações químicas das espécies constituintes do gás participante. No presente trabalho, por se tratar da análise de um problema homogêneo, a concentração química não é um parâmetro relevante, de modo que apenas o campo médio de temperatura é usado para tal inicialização. A solução obtida dessa forma é chamada de solução “sem TRI simples”.

Contudo, uma característica dessa abordagem é que a intensidade de radiação da solução sem TRI, $\langle I \rangle_{nTRI}$, é obtida da solução de uma expressão alternativa da RTE muito similar à original, na qual a única diferença é que a intensidade de corpo negro (ou $a_j I_b$, para o modelo WSGG) é avaliada utilizando o campo médio de temperatura, ao invés do seu campo instantâneo. Portanto, as informações sobre flutuações da intensidade de radiação local da solução transiente acabam sendo negligenciadas no cálculo de outros parâmetros dependentes

dessa grandeza, como o fluxo de calor por radiação e o seu divergente, o que pode resultar em uma aproximação indevida entre as soluções “com TRI” e “sem TRI”.

Logo, nesta dissertação, como forma de verificar a existência ou não de tal comportamento, uma nova metodologia para a inicialização da solução “sem TRI” é proposta e implementada. Nessa abordagem, denominada solução “sem TRI alternativa”, além do campo médio de temperatura, a intensidade de radiação local média também é computada dos dados instantâneos obtidos da simulação transiente. Na equação da transferência radiativa discretizada, isso implica em calcular a média temporal da intensidade para cada ângulo de controle e para cada volume dentro do domínio computacional (e cada gás cinza g , no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza).

4.4.2 Definição das diferenças percentuais entre soluções

Infelizmente, não é possível encontrar indicações claras na literatura sobre a forma mais apropriada para a definição das diferenças entre os resultados médios das soluções que consideram e que negligenciam a interação turbulência-radiação. Em geral, estudos que avaliam as contribuições do TRI através de comparações entre soluções não especificam como as diferenças empregadas são expressas, a despeito da importância dessa informação para a compreensão dos resultados.

Assim, no presente trabalho, dois tipos de diferenças são consideradas. A primeira é uma diferença relativa simples, ψ_{rel} , em que a diferença absoluta entre as soluções “com TRI” e “sem TRI” é normalizada por um valor local, conforme é dado na Eq. (4.7) para uma grandeza média arbitrária $\langle\phi\rangle$. A segunda, por outro lado, trata-se de uma diferença normativa, ψ_{norm} , expressa também para $\langle\phi\rangle$ na Eq. (4.8), em que a diferença absoluta entre as soluções é comparada ao valor máximo em todo o conjunto de dados, $\langle\phi\rangle_{max}$.

$$\psi_{rel,\langle\phi\rangle}(\%) = \left| \frac{\langle\phi\rangle_{TRI} - \langle\phi\rangle_{nTRI}}{\langle\phi\rangle_{nTRI}} \right| \times 100 \quad (4.7)$$

$$\psi_{norm,\langle\phi\rangle}(\%) = \left| \frac{\langle\phi\rangle_{TRI} - \langle\phi\rangle_{nTRI}}{\langle\phi\rangle_{max}} \right| \times 100 \quad (4.8)$$

4.5 Casos simulados

Nesta dissertação, a magnitude dos efeitos da interação turbulência-radiação é analisada em um escoamento interno não reativo para diversas situações. Os parâmetros variados entre os casos são a intensidade de turbulência do escoamento na entrada do domínio computacional, o modelo espectral empregado para avaliar as propriedades radiativas do meio, e o gás participante que compõe o fluido de trabalho.

O valor da intensidade de turbulência influencia diretamente na magnitude das flutuações que são impostas na seção de entrada do escoamento e que se propagam por certa distância ao longo do domínio computacional. Como as flutuações de temperatura e das propriedades radiativas são as responsáveis pela existência do TRI, espera-se que esse parâmetro tenha certa importância sobre o fenômeno. Conforme comentado na Seção 4.1, cinco valores distintos de IT são considerados, entre 0 % e 20 %.

O fluido de trabalho pode consistir de dióxido de carbono ou de vapor de água; misturas entre essas espécies ou com outros gases não participantes não são consideradas. A utilização de duas espécies químicas distintas implica em diferentes propriedades físicas, não apenas para a radiação térmica, mas também para o problema físico como um todo. É interessante avaliar como diferentes conjuntos de propriedades afetam o TRI, uma vez que é sabido que o fenômeno é caracterizado pela influência simultânea e recíproca entre turbulência e radiação.

No entanto, o objetivo central deste trabalho é observar como o TRI se comporta com diferentes modelos espectrais, ou seja, quando são adotadas formas distintas de se avaliar as propriedades radiativas do meio participante. Um dos modelos considerados é o da somponderada-de-gases-cinza, que permite que a variação espectral das propriedades radiativas seja contabilizada na solução da RTE. O modelo WSGG, conforme apresentado na Seção 2.5.2, é implementado com as correlações propostas por Cassol et al., 2014, para o dióxido de carbono e para o vapor de água.

O segundo modelo empregado é o modelo do gás cinza, introduzido na Seção 2.5.1, em que a dependência espectral das propriedades radiativas é negligenciada. Dentro desse modelo, duas abordagens são consideradas para o cálculo do coeficiente de absorção do meio: na primeira, denominada $GG_{\kappa(T)}$, este coeficiente é descrito como uma função da temperatura local, utilizando as expressões polinomiais definidas por Cassol et al., 2015, dadas na Eq. (2.37) e na Tabela 2.1; e, na segunda, o coeficiente de absorção é constante em todo o domínio computacional, com seu valor também calculado a partir das correlações de Cassol et al., 2015, avaliadas na temperatura de entrada do escoamento, o que resulta em $\kappa = 16,855 \text{ m}^{-1}$ para o CO_2 e $\kappa = 3,524 \text{ m}^{-1}$ para o H_2O . Esta abordagem é chamada de GG_{κ} .

Da combinação desses diferentes conjuntos de parâmetros (isto é, as cinco intensidades de turbulência, as duas espécies químicas e as três abordagens para a avaliação das propriedades radiativas), resulta uma série de trinta casos a serem computados. Conforme explicado na Seção 4.1.4, cada caso requer um processo iterativo para a determinação da temperatura do reservatório de saída para o cálculo radiativo, que, de maneira geral, requer três simulações adicionais para a convergência. Porém, todas essas simulações fornecem apenas os resultados da solução “com TRI”; portanto, para cada conjunto de parâmetros, são necessários mais dois cálculos numéricos para se estabelecer as soluções “sem TRI” através das duas metodologias adotadas neste trabalho – ou seja, a solução “sem TRI simples” e a solução “sem TRI alternativa”, discutidas na Seção 4.4. Além disso, no modelo WSGG, a verificação do fator de correção introduzido para o termo fonte radiativo, cuja dedução e resultados são apresentados no capítulo

seguinte, exige mais uma rodada de cálculo para cada caso.

Assim, considerando-se que, em certos casos, o processo iterativo para a definição da temperatura do reservatório de saída exige simulações adicionais para a convergência ou a atinge em um número menor de etapas, são realizadas no total 181 simulações computacionais para a obtenção dos resultados apresentados e discutidos no Capítulo 5 (isso não inclui os cálculos conduzidos para a análise da qualidade de malha ou para a determinação do período para o cálculo das médias temporais). Mais informações sobre cada um desses casos podem ser encontradas no Apêndice B.

5 RESULTADOS

Este capítulo apresenta os resultados obtidos nesta dissertação a partir da simulação dos casos descritos na Seção 4.5 e no Apêndice B, e está dividido em quatro partes. Na primeira, é feita a análise da magnitude dos efeitos da interação turbulência-radiação, considerando-se variações no modelo espectral utilizado, na intensidade de turbulência do escoamento e na espécie química que compõe o gás participante. Nas segunda e terceira partes, realizam-se discussões acerca das metodologias adotadas para a obtenção dos resultados expostos anteriormente: a Seção 5.2 trata da maneira como calcular a solução que negligencia os efeitos do TRI, e a Seção 5.3, faz uma análise da forma como são avaliadas as diferenças percentuais entre as soluções “com TRI” e “sem TRI”. Finalmente, na Seção 5.4 é introduzida uma correção para o termo fonte radiativo médio no modelo WSGG, mostrando resultados encontrados para diferentes casos.

5.1 Análise dos efeitos do TRI

Nesta seção, os efeitos do TRI são analisados pela comparação dos resultados encontrados com as simulações que consideram e que negligenciam o fenômeno. Esta comparação é feita em termos dos fluxos de calor médios nas paredes (tanto por radiação quanto por convecção) e do termo fonte radiativo médio. Por motivos que são discutidos na Seção 5.2, os fluxos de calor médios “com TRI” são sempre comparados com aqueles computados com a simulação “sem TRI simples”, inicializada com o campo médio de temperatura apenas, enquanto a mesma comparação para o termo fonte radiativo é feita em relação à solução “sem TRI alternativa”, cuja inicialização utiliza os campos médios de temperatura e intensidade de radiação local. Diferenças percentuais relativas simples são utilizadas na comparação dos fluxos de calor “com TRI” e “sem TRI”, e diferenças percentuais normativas são adotadas para a análise do termo fonte radiativo médio; as razões para tais escolhas são dadas na Seção 5.3.

Uma observação importante diz respeito às médias temporais reportadas para os fluxos de calor na parede. Esses valores são obtidos em pontos distribuídos ao longo de quatro linhas contidas nos planos longitudinais médios das superfícies sólidas do domínio computacional, ou seja, nas linhas $(y, z) = (0 \text{ m}, 0,25 \text{ m})$; $(0,5 \text{ m}, 0,25 \text{ m})$; $(0,25 \text{ m}, 0 \text{ m})$; e $(0,25 \text{ m}, 0,5 \text{ m})$. Então, faz-se médias aritméticas entre $\langle q''_w \rangle$ calculados nos quatro pontos contidos na mesma seção transversal, e adota-se esse valor como representativo da grandeza em cada cota x .

5.1.1 Influência da dependência espectral das propriedades radiativas do meio

Conforme descrito na Seção 4.5, uma série de casos é considerada, empregando-se três metodologias distintas para a avaliação das propriedades radiativas do meio – mais especificamente, do coeficiente de absorção. A primeira consiste na aplicação do modelo da soma-

ponderada-de-gases-cinza (cuja solução é denominada “WSGG”, neste capítulo), enquanto as outras duas fazem uso da hipótese de gás cinza, em que, em uma delas, κ é uma função da temperatura local (“GG $_{\kappa(T)}$ ”), e, na outra, tem um valor constante em todo o domínio (“GG $_{\kappa}$ ”). Essas diferentes abordagens são implementadas para analisar, através da comparação dos seus resultados, se a consideração da variação espectral das propriedades radiativas tem alguma influência sobre a magnitude do TRI no problema.

As Figuras 5.1 e 5.2 mostram, respectivamente, os perfis médios de temperatura e do termo fonte radiativo (este calculado na abordagem “com TRI”) computados com essas três metodologias, no plano longitudinal central do duto ($z = 0,25$ m), para o vapor de água e para o dióxido de carbono, com $IT = 10\%$. Dessas figuras, é possível notar, ainda que de forma qualitativa, que o comportamento encontrado com o modelo WSGG, tanto para $\langle T \rangle$ como para $\langle S_r \rangle_{TRI}$, é significativamente diferente daquele obtido com as duas variantes do modelo de gás cinza. Isso é esperado, tendo em vista o que é reportado em comparações entre os modelos do gás cinza e da soma-ponderada-de-gases-cinza. Por outro lado, os modelos GG $_{\kappa}$ e GG $_{\kappa(T)}$, apesar das diferenças no modo de avaliar o coeficiente de absorção, apresentam resultados bastante similares.

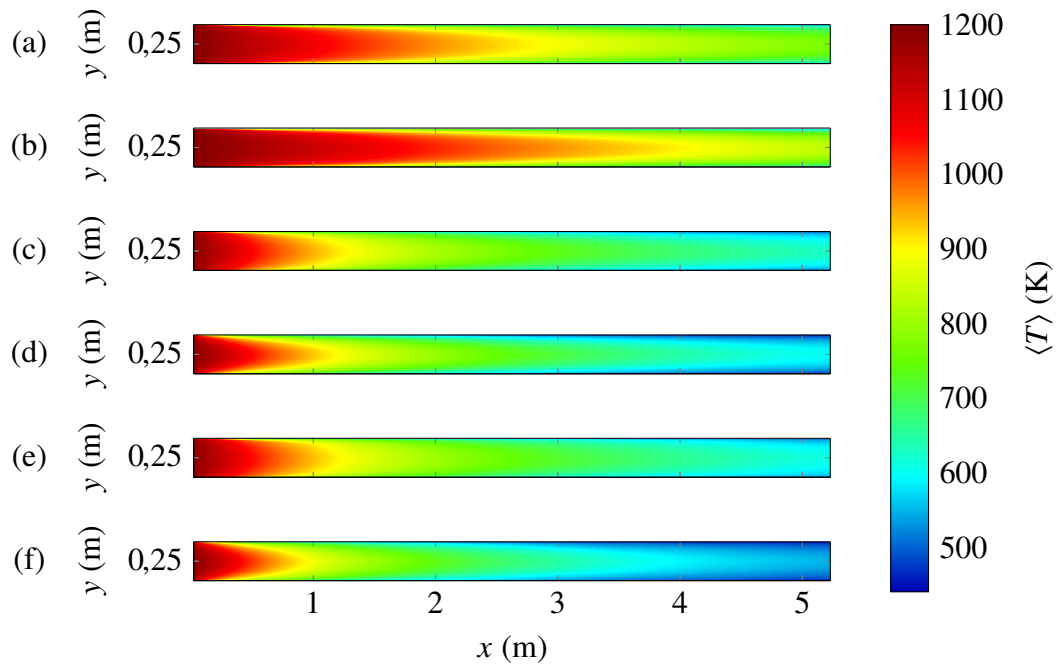


Figura 5.1 – Campo médio de temperatura no plano longitudinal central do duto, para $IT = 10\%$: H₂O, modelo WSGG (a); CO₂, WSGG (b); H₂O, modelo GG $_{\kappa(T)}$ (c); CO₂, GG $_{\kappa(T)}$ (d); H₂O, modelo GG $_{\kappa}$ (e); CO₂, GG $_{\kappa}$ (f).

Quanto às comparações entre soluções considerando e negligenciando os efeitos do TRI, a Figura 5.3 mostra a diferença percentual relativa encontrada para os fluxos de calor médios por radiação e por convecção, para o CO₂ e para o H₂O, novamente com $IT = 10\%$. Resultados

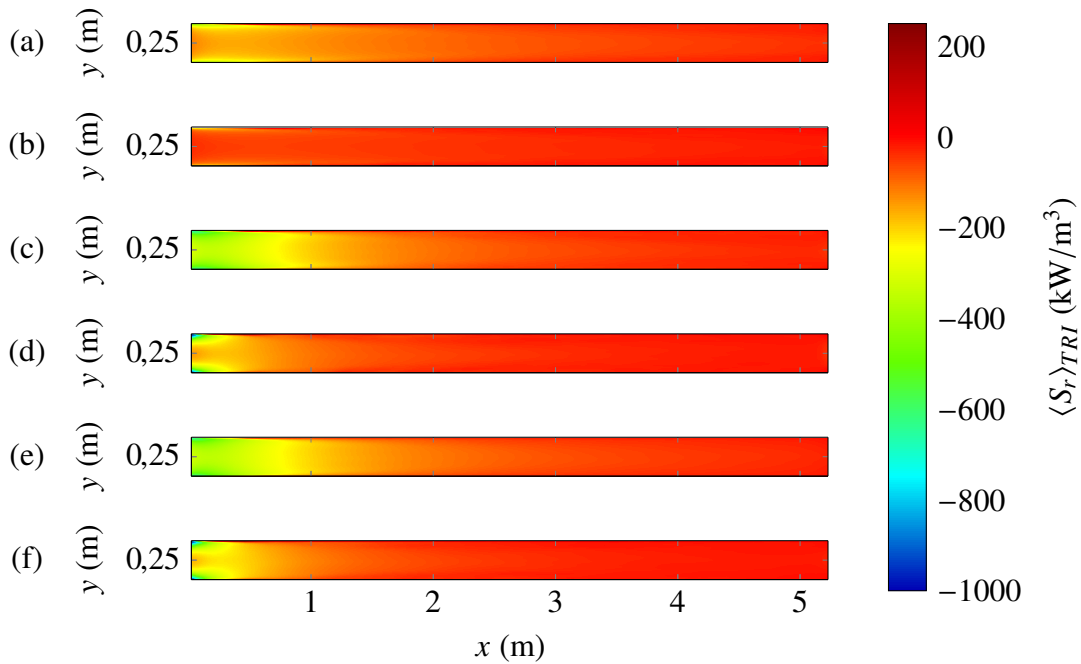


Figura 5.2 – Campo médio do termo fonte radiativo no plano longitudinal central do duto, para $IT = 10\%$: H_2O , modelo WSGG (a); CO_2 , WSGG (b); H_2O , modelo $GG_{\kappa(T)}$ (c); CO_2 , $GG_{\kappa(T)}$ (d); H_2O , modelo GG_{κ} (e); CO_2 , GG_{κ} (f).

obtidos para outras intensidades de turbulência possuem comportamentos semelhantes.

Como mostrado nas Figuras 5.3a e 5.3b, os desvios relativos entre as médias temporais do fluxo de calor radiativo superficial “com TRI” e “sem TRI” são de menos de 2% para todos os modelos. Esse é um valor pequeno e da mesma magnitude que as diferenças encontradas para o fluxo de calor convectivo médio, Figuras 5.3c e 5.3d. Como comentado na Seção 2.4, a radiação térmica é um processo bastante não linear, enquanto a transferência de calor por convecção é, em geral, proporcional às diferenças de temperatura elevadas à primeira potência. Uma vez que o TRI é um fenômeno resultante do acoplamento não linear entre as flutuações turbulentas de intensidade e de temperatura [Coelho, 2007], caso o efeito das interações entre turbulência e radiação fosse importante no problema estudado, seria esperado observar erros significativamente maiores para $\langle q''_{r,w} \rangle$ do que para $\langle q''_{c,w} \rangle$.

Assim, pode-se concluir que, pelo menos em termos do fluxo de calor médio por radiação nas paredes do duto, o TRI não é importante no problema analisado no presente estudo. Isso é condizente com o que é reportado por outros trabalhos tratando de escoamentos não reativos, como em Mazumder e Modest, 1999b, Gupta et al., 2009, e Velasco, 2014.

Em relação aos resultados de cada metodologia de avaliação das propriedades radiativas, o modelo WSGG levou às maiores diferenças percentuais, especialmente nas regiões longe da entrada e da saída do escoamento no domínio computacional. Na região próxima à entrada, a pequena diferença entre os modelos pode ser explicada pelo fato de se ter imposto, em todos os casos, o mesmo valor constante de temperatura para o escoamento que entra no domínio

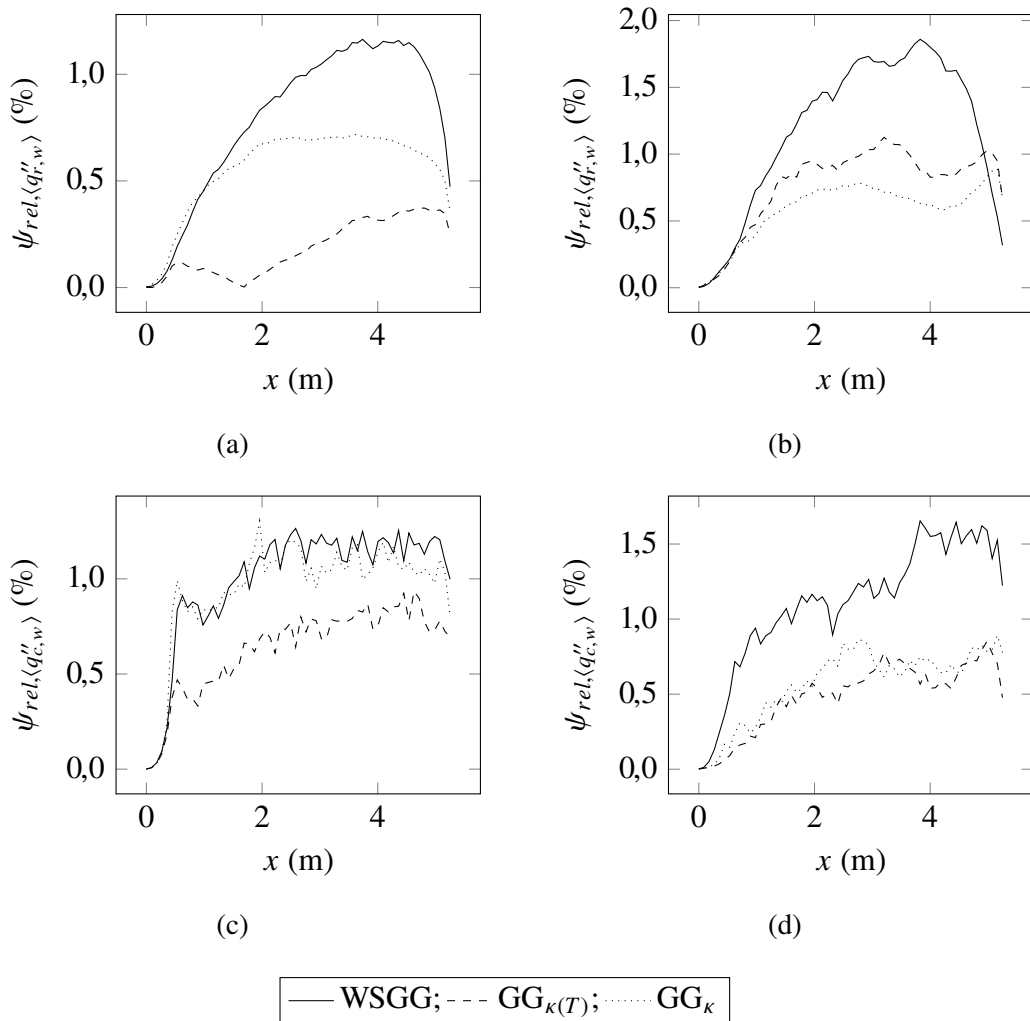


Figura 5.3 – Diferenças relativas entre as soluções “com TRI” e sem “TRI” para as médias dos fluxos de calor radiativo e convectivo na parede, com $IT = 10\%$. Da esquerda para a direita: resultados para o H_2O e para o CO_2 ; de cima para baixo: $\langle q''_{r,w} \rangle$ e $\langle q''_{c,w} \rangle$.

computacional. Nas proximidades da saída do duto, a diferença entre os modelos novamente cai, provavelmente porque nessa região há uma contribuição maior da temperatura do reservatório externo para a troca de calor nas paredes. Embora tenha valores distintos para cada modelo, essa temperatura é prescrita de forma constante, ou seja, não inclui informações sobre a magnitude das flutuações turbulentas.

O fato de as maiores diferenças de $\langle q''_{r,w} \rangle$ terem sido encontradas com o modelo WSGG é uma indicação de que a consideração da dependência espectral das propriedades radiativas tem certa influência no sentido de amplificar os efeitos do TRI. Isso fica claro quando se nota que as diferenças percentuais para o fluxo de calor convectivo médio (para o qual a forma de avaliar as propriedades radiativas não é importante) têm um comportamento similar para todos os modelos, enquanto o mesmo não é observado para o fluxo de calor radiativo médio.

A explicação para a inclusão da dependência espectral na avaliação do coeficiente de

absorção ter alterado a magnitude da interação turbulência-radiação no problema pode ser em parte encontrada no trabalho de Hall e Vranos, 1994. Nesse estudo, os autores reportam que bandas espectrais individuais do meio participante (isto é, porções quase infinitesimais do espectro de comprimento de onda da radiação térmica) respondem de forma diferente a flutuações de temperatura, em função da maneira como a intensidade de radiação de corpo negro varia com a temperatura no interior da banda. Hall e Vranos, 1994, analisaram apenas o vapor de água, mas é razoável assumir que o mesmo comportamento é experimentado por outras espécies de gases participantes.

Portanto, em certas regiões do espectro, a intensidade de radiação média – e, por consequência, as médias temporais do fluxo de calor radiativo e do termo fonte radiativo – pode ser afetada mais fortemente por flutuações turbulentas, enquanto em outras partes do espectro essas flutuações não irão contribuir em absoluto para a transferência radiativa. Ao se negligenciar a variação espectral, como no modelo do gás cinza, esse comportamento não é captado de forma alguma. No modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza, como a dependência espectral é incluída, espera-se que o TRI possua magnitude diferente. O fato de, nos casos simulados, o modelo WSGG ter resultado em maiores desvios entre as soluções “com TRI” e “sem TRI” significa que, quando somadas as contribuições da interação turbulência-radiação para cada banda espectral individual, tem-se ao final uma amplificação do efeito do fenômeno no problema analisado. No entanto, não é possível afirmar que a consideração da variação espectral das propriedades radiativas do meio sempre resultará em um aumento do TRI, independentemente do caso avaliado; por exemplo, na análise da chama Sandia D, Modest, 2005 encontrou justamente o resultado oposto, com o TRI apresentando maior impacto para o modelo do gás cinza do que quando a dependência espectral foi considerada (através do modelo FSCK).

É interessante observar ainda que, dentre as abordagens que utilizam a hipótese de gás cinza, o modelo $GG_{\kappa(T)}$ apresenta erros menores de $\langle q''_{r,w} \rangle$ que o modelo GG_{κ} nas simulações com o vapor de água, e esse comportamento se inverte para o dióxido de carbono. Isso pode ser explicado pela forma como o coeficiente de absorção é correlacionado com a intensidade de radiação de corpo negro nesse modelo. Comparando as expressões médias para a equação da transferência radiativa, Eqs. (2.49) e (2.50), tem-se que, caso a correlação $\langle \kappa I_b \rangle$ seja positiva, há uma contribuição no sentido de aumentar a intensidade de radiação calculada negligenciando-se o TRI (em relação ao valor calculado quando coeficiente de absorção é constante e a correlação é, portanto, nula); conseqüentemente, o valor de $\langle q''_{r,w} \rangle_{nTRI}$ é mais elevado, resultando em um aumento da diferença relativa $\psi_{rel,\langle q''_{r,w} \rangle}$. De forma recíproca, se $\langle \kappa I_b \rangle < 0$, a contribuição na RTE é negativa, e a tendência é obterem-se menores $\psi_{rel,\langle q''_{r,w} \rangle}$.

Sob essa ótica, a Figura 5.4 mostra, para a faixa de temperaturas encontrada nos casos simulados, as distribuições da intensidade de corpo negro, dada pela Eq. (2.26), e de κ como uma função polinomial de T , seguindo as correlações propostas por Cassol et al., 2015. Nota-se, para o vapor de água, que a correlação $\langle \kappa I_b \rangle$ é negativa em todo o intervalo de temperatura considerado; por outro lado, de $T = 400$ K até aproximadamente $T = 650$ K, essa correlação

é positiva para o dióxido de carbono, e torna-se negativa apenas para valores mais altos de temperatura. Assim, como a maior parte do domínio se encontra em temperaturas inferiores a 650 K – especialmente nas proximidades das paredes, que são as regiões mais importantes para a determinação do fluxo de calor radiativo superficial –, é esperado que, para o CO_2 , $\psi_{rel,\langle q''_{r,w} \rangle}$ seja maior no modelo $\text{GG}_{\kappa(T)}$ do que no modelo GG_{κ} , e que tenha o comportamento inverso para o H_2O .

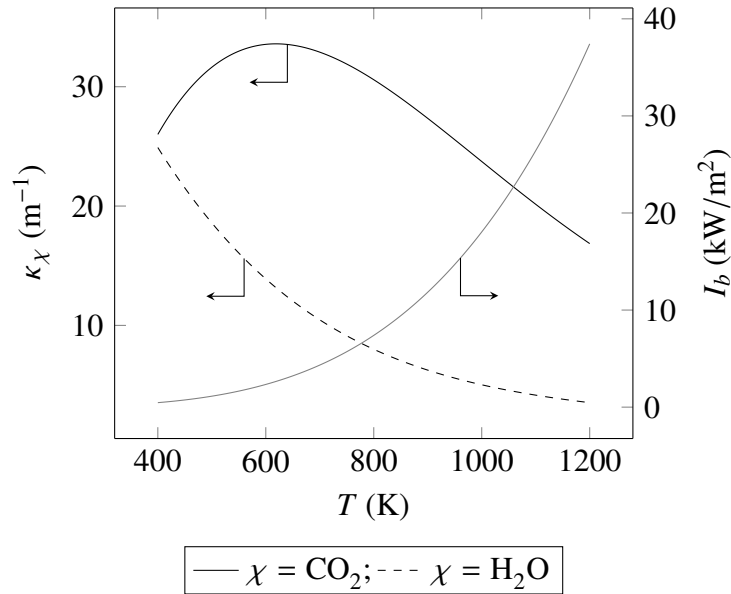


Figura 5.4 – Comportamento do coeficiente de absorção em função da temperatura para o CO_2 e o H_2O no modelo $\text{GG}_{\kappa(T)}$, usando as correlações de Cassol et al., 2015, e comportamento da intensidade de corpo negro, também em função da temperatura.

Perfis da diferença normativa para o termo fonte radiativo médio obtidos com cada modelo espectral ao longo de três planos longitudinais distintos são apresentados na Figura 5.5, para o CO_2 como gás participante e com $IT = 10\%$. Resultados obtidos para outras intensidade de turbulência e utilizando o vapor de água como gás participante seguem o mesmo comportamento evidenciado na figura e não são mostrados aqui por brevidade. É importante ressaltar que, independentemente de em qual plano longitudinal a distribuição de $\psi_{norm,\langle S_r \rangle}$ é mostrada na Figura 5.5, o denominador na expressão que define a diferença normativa, Eq. (4.8), tem sempre o mesmo valor para um mesmo caso simulado – isto é, é o valor máximo de $\langle S_r \rangle_{nTRI}$ em todo o domínio computacional.

Em geral, na Figura 5.5 observa-se que o TRI é um pouco mais pronunciado nas proximidades das paredes, e é praticamente nulo no núcleo do escoamento. Uma possível explicação para isso pode estar na camada limite que se forma sobre as superfícies sólidas e causa maiores flutuações locais de temperatura e das propriedades radiativas, o que acaba por aumentar o efeito das interações entre turbulência e radiação nessas regiões.

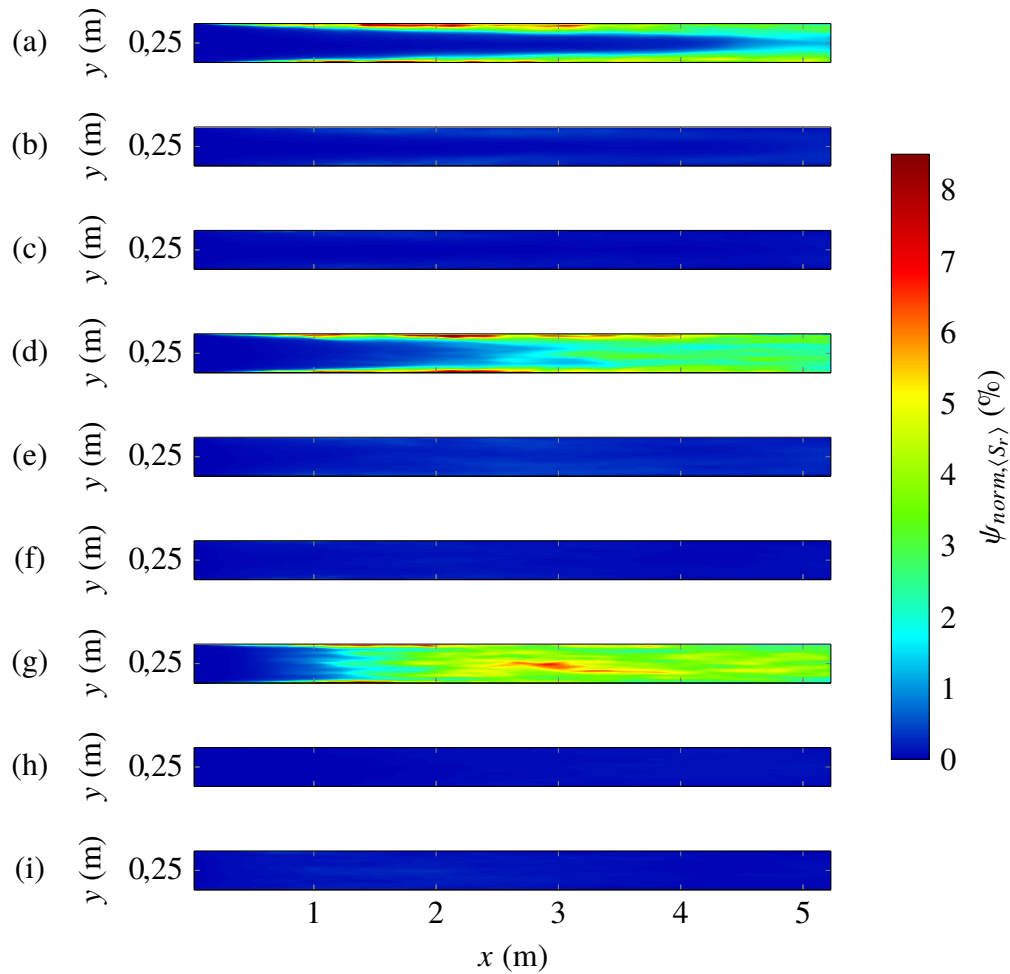


Figura 5.5 – Diferenças normativas de $\langle S_r \rangle$ entre as soluções “com TRI” e sem “TRI” para o CO_2 e com $IT = 10\%$, para os modelos WSGG (a, d, g), $\text{GG}_{k(T)}$ (b, e, h) e GG_k (c, f, i); e nos planos longitudinais $z = 0,25$ m (a, b, c), $z = 0,125$ m (d, e, f) e $z = 0,0625$ m (g, h, i).

Quanto aos diferentes modelos espectrais, da mesma forma que para o fluxo de calor radiativo médio nas paredes, os erros encontrados com o modelo WSGG são superiores àqueles obtidos com as abordagens que negligenciam as variações espectrais do coeficiente de absorção. Isso é observado para todos os casos simulados, conforme é mostrado na Tabela 5.1, que apresenta as diferenças normativas locais máximas para $\langle S_r \rangle$ e a média aritmética dos valores de $\psi_{norm,\langle S_r \rangle}$ avaliado em cada volume do domínio computacional. Tal comportamento corrobora a conclusão exposta anteriormente, no contexto do fluxo de calor superficial por radiação, de que a inclusão da variação espectral na avaliação das propriedades radiativas do meio tem certa influência sobre a magnitude dos efeitos do TRI.

Na Tabela 5.1, verifica-se ainda a existência de diferenças normativas máximas de até cerca de 20% entre $\langle S_r \rangle_{TRI}$ e $\langle S_r \rangle_{nTRI}$, quando o modelo WSGG é implementado em conjunto com o dióxido de carbono e a maior intensidade de turbulência considerada. Esse valor é significativamente mais alto que os erros reportados em outros estudos sobre o TRI

Tabela 5.1 – Diferenças percentuais normativas para o termo fonte radiativo médio com o vapor de água e o dióxido de carbono.

Modelo espectral	IT (%)	H_2O		CO_2	
		Médio	Máximo	Médio	Máximo
WSGG	0	-	-	1,437	9,862
	5	0,259	1,674	1,855	10,508
	10	0,310	1,920	2,392	12,704
	15	0,355	2,676	2,883	16,712
	20	0,391	3,191	3,301	19,779
	0	0,049	0,477	0,144	0,899
$GG_{\kappa(T)}$	5	0,053	0,500	0,154	0,825
	10	0,061	0,741	0,205	1,138
	15	0,071	0,861	0,264	1,244
	20	0,078	1,031	0,329	1,562
	0	0,150	2,355	0,064	0,682
GG_{κ}	5	0,097	1,118	0,074	0,609
	10	0,121	1,481	0,099	0,753
	15	0,150	2,355	0,135	0,978
	20	0,174	2,577	0,170	1,413

em escoamentos não reativos, como em Gupta et al., 2009 e Velasco, 2014, mas é próximo às diferenças encontradas por Santos et al., 2014 para os fluxos de calor médios em meios opticamente espessos.

No entanto, algumas ressalvas devem ser feitas quanto aos resultados relativamente altos de $\psi_{norm,\langle S_r \rangle}$ observados em algumas das simulações deste trabalho. Primeiramente, esses valores tratam-se de máximos locais dentro do domínio tridimensional; a média de $\psi_{norm,\langle S_r \rangle}$, calculada sobre todo o domínio, é bastante inferior a isso e fica na mesma ordem de magnitude que as diferenças obtidas para os fluxos de calor superficiais. Além disso, os estudos citados no parágrafo anterior não baseiam as suas análises sobre o TRI em resultados para o termo fonte radiativo médio, mas em outras variáveis características do problema de transferência de calor por radiação (como a intensidade ou o fluxo de calor). Infelizmente, a quantidade de informações disponíveis na literatura sobre a interação turbulência-radiação em escoamentos não reativos, com as quais os resultados do presente trabalho podem ser comparados para a sua validação, é pequena – pelo menos em relação ao que se pode encontrar sobre o tema aplicado a problemas reativos.

5.1.2 Influência da intensidade de turbulência do escoamento na entrada

Nas simulações realizadas, cinco valores distintos de intensidade de turbulência do escoamento na seção de entrada do domínio são considerados: $IT = 0\%$, 5% , 10% , 15% e 20% . Estes valores são simulados para o H_2O e para o CO_2 e para os três modelos espectrais implementados. A única exceção é o caso do vapor de água com o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza para $IT = 0\%$, que, por problemas de convergência e de custo computacional, não foi calculado. Mais informações a respeito podem ser encontradas no Apêndice B.

A magnitude da intensidade de turbulência do escoamento que entra no duto influencia o campo de velocidade instantâneo em praticamente todo o domínio, conforme mostrado na Figura 5.6. Essa variação da intensidade de turbulência afeta também o campo instantâneo de temperatura, principalmente até a metade do comprimento do duto, como pode ser visto na Figura 5.7. Após essa distância da entrada, o comportamento do campo de temperatura é basicamente independente de IT .

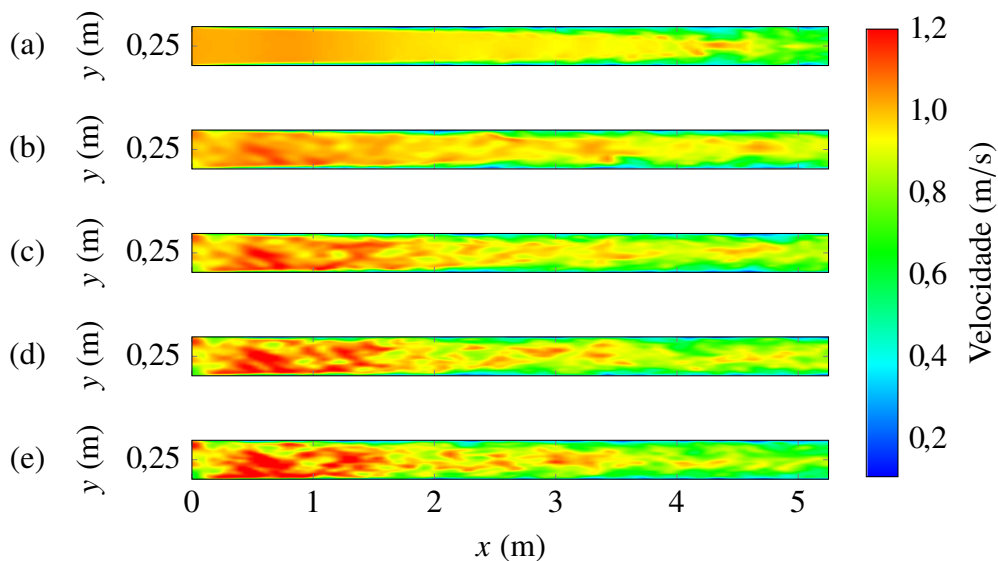


Figura 5.6 – Campo instantâneo de velocidade no plano longitudinal médio do duto em $t = 15$ s, para o CO_2 e com o modelo WSGG, para diferentes valores de IT : 0% (a), 5% (b), 10% (c), 15% (d), e 20% (e).

Diferenças relativas entre as médias temporais dos fluxos de calor radiativo nas paredes considerando e negligenciando o TRI são mostradas na Figura 5.8. Por clareza, são apresentados apenas os resultados obtidos com $IT = 0\%$, $IT = 10\%$ e $IT = 20\%$; no entanto, é evidente a tendência de $\psi_{rel, \langle q''_{r,w} \rangle}$ de aumentar para maiores valores de IT , independentemente do modelo espectral empregado ou da espécie constituinte do gás participante. Esse comportamento pode também ser observado para as diferenças normativas do termo fonte radiativo, na Tabela 5.1.

O aumento das contribuições da interação turbulência-radiação para maiores intensidades

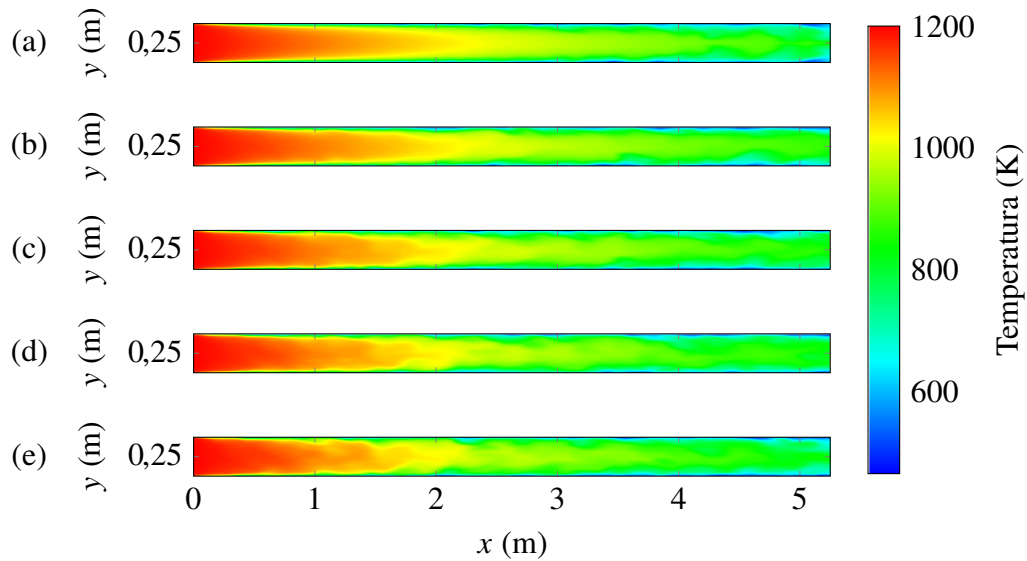


Figura 5.7 – Campo instantâneo de temperatura no plano longitudinal médio do duto em $t = 15$ s, para o CO_2 e com o modelo WSGG, para diferentes valores de IT : 0% (a), 5% (b), 10% (c), 15% (d), e 20% (e).

de turbulência é um resultado esperado. Conforme discutido anteriormente, como a radiação térmica é um processo governado por equações não lineares – como, por exemplo, a RTE –, flutuações das grandezas presentes nessas expressões levam a diferenças entre valores médios calculados a partir de dados instantâneos e valores computados de variáveis médias; de fato, essa é a descrição mais básica de como se manifestam os efeitos do TRI [Coelho, 2007]. Quanto maiores forem as flutuações, maior será a diferença entre esses valores, ou seja, entre as soluções “com TRI” e “sem TRI”.

Isso é facilmente verificável analisando uma situação na qual não existem quaisquer flutuações de temperatura ou concentração química: nesse caso, $\langle T \rangle = T$ e $\langle Y \rangle = Y$, e as Eqs. (2.53) e (2.54) são idênticas entre si (da mesma forma que as Eqs. (2.51) e (2.52), para o fluxo de calor radiativo médio); assim, $\langle S_r \rangle_{TRI} = \langle S_r \rangle_{nTRI}$ e, por consequência, a contribuição do TRI é nula para o problema. Portanto, como IT é um parâmetro diretamente relacionado à magnitude das flutuações de velocidade e de temperatura, conforme evidenciado nas Figuras 5.6 e 5.7, é razoável assumir que intensidades de turbulência mais elevadas tendam a promover os efeitos da interação turbulência-radiação.

5.1.3 Influência das diferentes espécies químicas de gás

Dois fluidos de trabalho são considerados nas simulações do presente trabalho, ambos constituídos totalmente de uma única espécie química, vapor de água ou dióxido de carbono. Conforme já comentado, a razão pela escolha de gases participantes compostos unicamente de uma espécie – em oposição a misturas de CO_2 e H_2O , por exemplo – se dá pela maior

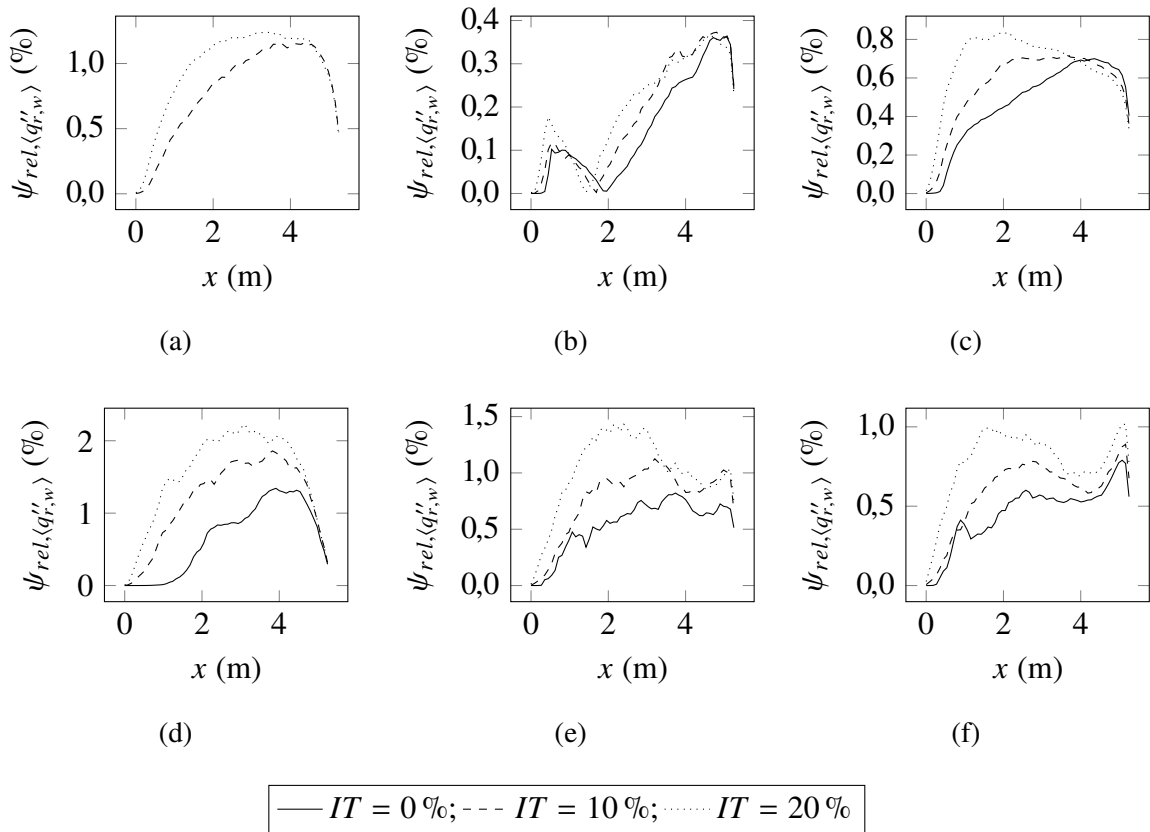


Figura 5.8 – Diferenças relativas entre as soluções “com TRI” e sem “TRI” para o fluxo de calor radiativo médio na parede. Da esquerda para a direita: resultados com os modelos WSGG, $GG_{\kappa(T)}$ e GG_{κ} ; de cima para baixo: resultados para o H_2O e CO_2 .

simplicidade da implementação de tal condição no código numérico empregado.

De qualquer modo, como o dióxido de carbono e o vapor de água possuem propriedades razoavelmente distintas entre si, é esperado que simulações realizadas com esses gases levem a comportamentos físicos diferentes. Isso pode ser verificado nas Figuras 5.9 e 5.10, que mostram, respectivamente, resultados para o campo médio de temperatura e o campo médio do termo fonte radiativo obtidos com essas duas espécies ao longo do plano longitudinal médio do domínio, para o modelo WSGG com $IT = 10\%$. De forma geral, o dióxido de carbono apresenta temperaturas médias mais elevadas e valores absolutos também maiores para o termo fonte radiativo médio.

Na Figura 5.11, tem-se as diferenças relativas entre o fluxo de calor radiativo superficial médio computado considerando e negligenciando o TRI com as duas espécies químicas, para os três modelos espectrais implementados nesta dissertação e com $IT = 10\%$. Nas Figuras 5.11a e 5.11b, que mostram o comportamento de $\psi_{rel, \langle q''_{r,w} \rangle}$ para os modelos WSGG e $GG_{\kappa(T)}$, respectivamente, os efeitos do TRI são claramente mais relevantes para o CO_2 ; por outro lado, na Figura 5.11c, que apresenta as diferenças relativas para o modelo GG_{κ} , os resultados encontrados com as duas espécies são mais similares.

Essa tendência pode ser observada também na Tabela 5.1, para o termo fonte radiativo

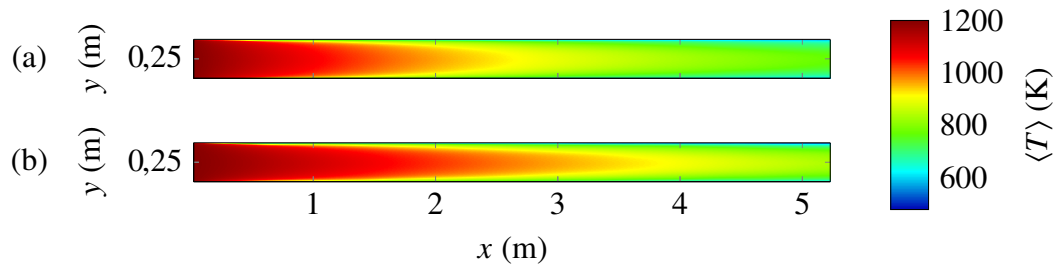


Figura 5.9 – Campo médio de temperatura no plano longitudinal médio do duto para o vapor de água (a) e para o dióxido de carbono (b).

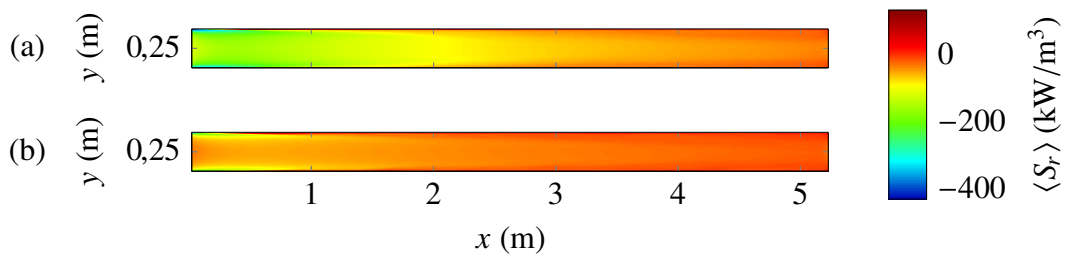


Figura 5.10 – Campo médio do termo fonte radiativo no plano longitudinal médio do duto para o vapor de água (a) e para o dióxido de carbono (b).

médio. Nessa tabela, tem-se que as diferenças de $\psi_{\langle S_r \rangle}$ entre o dióxido de carbono e o vapor de água são de uma ordem de magnitude para os modelos WSGG e $GG_{\kappa(T)}$, enquanto para o modelo GG_{κ} a diferença entre os resultados com cada espécie é significativamente menor.

Embora todas as propriedades do vapor de água e do dióxido de carbono sejam distintas entre si, o coeficiente de absorção é, dentre elas, a propriedade mais importante no contexto do TRI. Logo, parece razoável tentar explicar os resultados da Figura 5.11 em termos dessa grandeza.

No modelo $GG_{\kappa(T)}$, o coeficiente de absorção do gás cinza é uma função polinomial da temperatura, na qual os coeficientes da função mudam dependendo do gás utilizado de acordo com a Tabela 2.1. Assim, flutuações de temperatura geram flutuações do coeficiente de absorção, que, em última instância, influenciam a magnitude das flutuações da intensidade de radiação e, por consequência, a importância do TRI no problema. Naturalmente, no modelo $GG_{\kappa(T)}$, a intensidade das flutuações de κ está ligada aos coeficientes do polinômio, ou seja, à espécie do gás. Por outro lado, no modelo GG_{κ} , embora o coeficiente de absorção seja diferente entre as duas espécies, ele é um valor constante; portanto, flutuações turbulentas de temperatura não implicam em flutuações de κ , de forma que nenhuma informação sobre as flutuações de temperatura é acrescentada ao efeito do TRI por variações do coeficiente de absorção. Isso explica o fato de serem observadas, para o modelo $GG_{\kappa(T)}$, grandes diferenças entre os valores de $\psi_{rel, \langle q''_{r,w} \rangle}$ calculados com o CO_2 e com o H_2O , enquanto pouca diferença entre os resultados

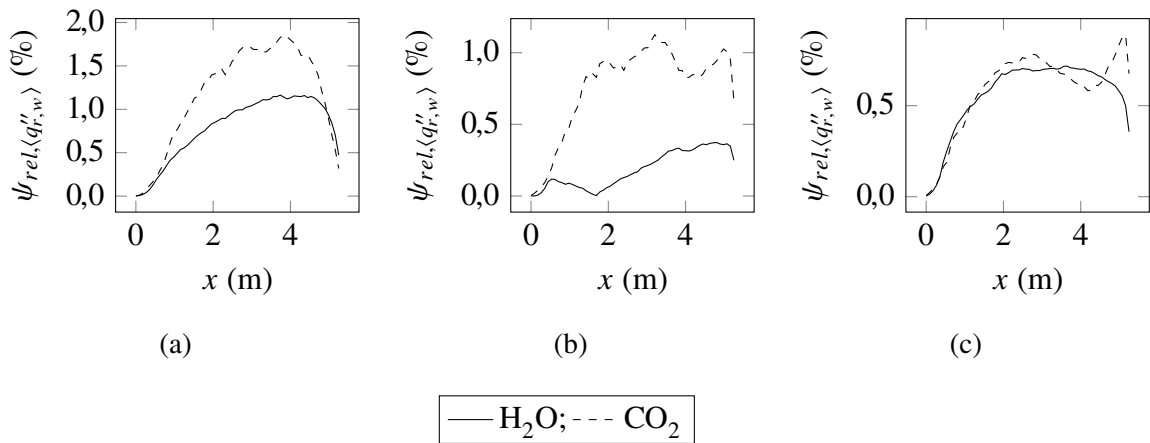


Figura 5.11 – Diferenças relativas entre as soluções “com TRI” e sem “TRI” para o fluxo de calor radiativo médio na parede, com $IT = 10\%$, para os modelos WSGG (a), $GG_{\kappa(T)}$ (b) e GG_{κ} (c).

dessas espécies é encontrada com o modelo GG_{κ} .

Um paralelo pode ser traçado com o comportamento observado nos cálculos aplicando o modelo WSGG. Nesse modelo, flutuações de temperatura também são amplificadas ou amortecidas por coeficientes de uma função polinomial – nesse caso, o coeficiente de temperatura $a_{j,\chi}(T)$ de cada gás cinza – cujos valores dependem da espécie química sendo simulada. No entanto, esse efeito é mais complexo no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza, pois, como forma de modelar a dependência espectral do problema, ele deve ser contabilizado uma vez para cada gás cinza que compõe o modelo, em conjunto com o coeficiente de absorção.

Entretanto, isso não implica necessariamente que a diferença entre os valores de ψ obtidos com o CO_2 e com o H_2O deva ser maior quando o cálculo é feito com o modelo WSGG, porque outros fatores além da modelagem espectral influenciam o comportamento do TRI nessas duas espécies. De fato, é interessante observar que, quando comparados em termos do fluxo de calor radiativo médio, o modelo $GG_{\kappa(T)}$ apresenta consistentemente maiores diferenças entre os valores de $\psi_{rel,\langle q''_{r,w} \rangle}$ computados com cada espécie química do que o modelo WSGG. Por outro lado, ao se analisar o termo fonte radiativo médio, é com o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza que se constata as maiores diferenças entre $\psi_{norm,\langle S_r \rangle}$ calculados com o dióxido de carbono e com o vapor de água.

5.2 Discussão sobre a forma de obter a solução “sem TRI”

Nesta dissertação, para a obtenção dos resultados médios sem a inclusão dos efeitos da interação turbulência-radiação, duas metodologias são implementadas. Conforme descrito na Seção 4.4.1, essas soluções são denominadas “sem TRI simples” e “sem TRI alternativa”. Dependendo de qual abordagem é escolhida para a comparação com a solução “com TRI”, a análise

da magnitude do TRI pode resultar em comportamentos distintos. Assim, nesta seção, são discutidas as implicações de cada metodologia sobre a avaliação do TRI nas grandezas monitoradas no presente trabalho – ou seja, nos fluxos médios de calor nas paredes e no termo fonte radiativo médio.

5.2.1 Os fluxos de calor

A única diferença entre as soluções “sem TRI simples” e “sem TRI alternativa” está na inclusão ou não do campo médio de intensidade de radiação na inicialização do cálculo numérico que gera os resultados nos quais os efeitos do TRI são negligenciados. Portanto, como o fluxo de calor convectivo médio é uma função somente dos campos de temperatura e de velocidade, é esperado que não haja diferenças entre os valores de $\langle q''_{c,w} \rangle_{nTRI}$ computados através das duas abordagens. De fato, ao se analisar os resultados das simulações, tal comportamento é observado para todos os casos considerados no presente trabalho.

Por outro lado, quanto à média do fluxo de calor radiativo na parede, espera-se que os resultados das duas abordagens sejam diferentes. Conforme a Eq. (2.52), as soluções “sem TRI simples” e “sem TRI alternativa” divergem no termo associado à intensidade incidente na superfície (primeiro termo no interior dos colchetes). Na abordagem simples, essa grandeza é calculada através da solução da RTE, Eq. (2.50), utilizando o campo médio de temperatura para a avaliação das propriedades radiativas e da intensidade de corpo negro; na abordagem alternativa, por sua vez, a intensidade incidente é obtida diretamente da média temporal do seu campo instantâneo, computado de uma simulação transiente. Uma importante consequência disso é que, neste último caso, $\langle q''_{r,w} \rangle_{TRI} = \langle q''_{r,w} \rangle_{nTRI}$, e, por consequência, $\psi_{\langle q''_{r,w} \rangle} = 0$. Com efeito, em todos os pontos em que a diferença relativa para $\langle q''_{r,w} \rangle$ é computada no pós-processamento das simulações nesta dissertação, encontra-se um valor nulo quando são utilizados dados da solução “sem TRI alternativa”.

As concordâncias entre predições teóricas baseadas no equacionamento que rege o problema e resultados encontrados no pós-processamento das simulações realizadas com cada metodologia de solução “sem TRI”, observadas em termos tanto do fluxo de calor convectivo superficial médio como do fluxo de calor radiativo médio, apontam que essas abordagens estão implementadas de forma correta no presente trabalho. Quanto à escolha da metodologia a ser utilizada para gerar a solução negligenciando os efeitos da interação turbulência-radiação (para os fluxos de calor superficiais médios), opta-se pela solução “sem TRI simples”. A principal vantagem dessa abordagem em relação à solução alternativa é que esta última implica necessariamente em $\psi_{\langle q''_{r,w} \rangle} = 0$, conforme discutido no parágrafo anterior, o que a torna inadequada para a análise do TRI em termos do fluxo de calor radiativo médio; adicionalmente, como ambas as soluções “sem TRI” resultam no mesmo resultado para o fluxo de calor superficial médio por convecção, não havendo portanto desvantagem na escolha de uma ou outra metodologia para a análise de $\langle q''_{c,w} \rangle$, a solução “sem TRI simples” parece a mais apropriada para a avaliação de

ambos os fluxos de calor médios trocados com as paredes do duto.

5.2.2 O termo fonte radiativo

A Eq. (2.54) mostra a expressão para o termo fonte radiativo calculado a partir dos campos médios. Nessa equação, assim como a discussão feita para o fluxo de calor radiativo, a diferença entre as duas abordagens para a solução “sem TRI” está no termo relacionado à intensidade local de radiação (isto é, o primeiro termo à direita da igualdade). Porém, como na equação original para S_r , a intensidade local está correlacionada com o coeficiente de absorção, tem-se que, diferentemente de $\langle q''_{r,w} \rangle_{nTRI}$, em nenhuma das abordagens o termo fonte radiativo “sem TRI” é igual ao seu valor no cálculo “com TRI”.

A decisão de qual das metodologias empregar na análise do TRI é tomada tendo como base o conceito físico do fenômeno e sua importância no contexto da engenharia. No entanto, é importante ressaltar que esta é uma escolha um tanto arbitrária e que não é possível corroborá-la ou refutá-la baseada em estudos anteriores, visto que não foi encontrada na literatura nenhuma discussão sobre a maneira mais apropriada de reproduzir a solução “sem TRI” em uma análise LES.

Conforme explicado anteriormente, os efeitos do TRI têm impacto sobre qualquer simulação numérica em que a turbulência é modelada de alguma forma. Particularmente, o foco desta dissertação está nas contribuições da interação turbulência-radiação no contexto da modelagem da turbulência com médias de Reynolds (embora essa modelagem não seja de fato adotada no presente trabalho, como é discutido na subseção seguinte), na qual, segundo uma série de trabalhos prévios, o TRI se manifesta de forma mais significativa. Sob a ótica dessa modelagem, tem-se que, em uma equação não linear ou em um sistema de equações não lineares, a solução de qualquer variável a partir de grandezas médias está sujeita a desvios em relação à média temporal da solução obtida utilizando grandezas instantâneas, quando estas experimentam flutuações no tempo. Portanto, é razoável assumir que, quanto maior o número de valores médios incluídos expressamente no equacionamento, tende-se a aumentar o erro em relação ao resultado “com TRI”.

Esse raciocínio motiva a decisão de se adotar, para a avaliação de $\langle S_r \rangle_{nTRI}$, os resultados dos cálculos numéricos inicializados com o campo médio de temperatura e com o campo médio de intensidade de radiação (solução “sem TRI alternativa”). A partir desses resultados, a diferença normativa para o termo fonte radiativo médio é calculada, para as análises reportadas na Seção 5.1.

Embora, como já comentado, não tenham sido encontrados na literatura estudos semelhantes que permitam a verificação da metodologia empregada, a validade da discussão feita nos parágrafos anteriores pode ser avaliada. Com esse propósito, a Figura 5.12 mostra os campos de $\psi_{norm, \langle S_r \rangle}$ computados com as soluções “sem TRI simples” e “sem TRI alternativa”, em três planos longitudinais do duto, para o CO₂ no modelo WSGG com $IT = 10\%$. Observa-se, como

esperado, que a abordagem alternativa para a solução “sem TRI” resulta em maiores erros do que a abordagem simples. Isso também pode ser visto na comparação da Tabela 5.1 com a Tabela 5.2, que apresenta as diferenças normativas médias e máximas para $\langle S_r \rangle$, computado considerando o TRI e desconsiderando-o através da inicialização apenas do campo médio de temperatura.

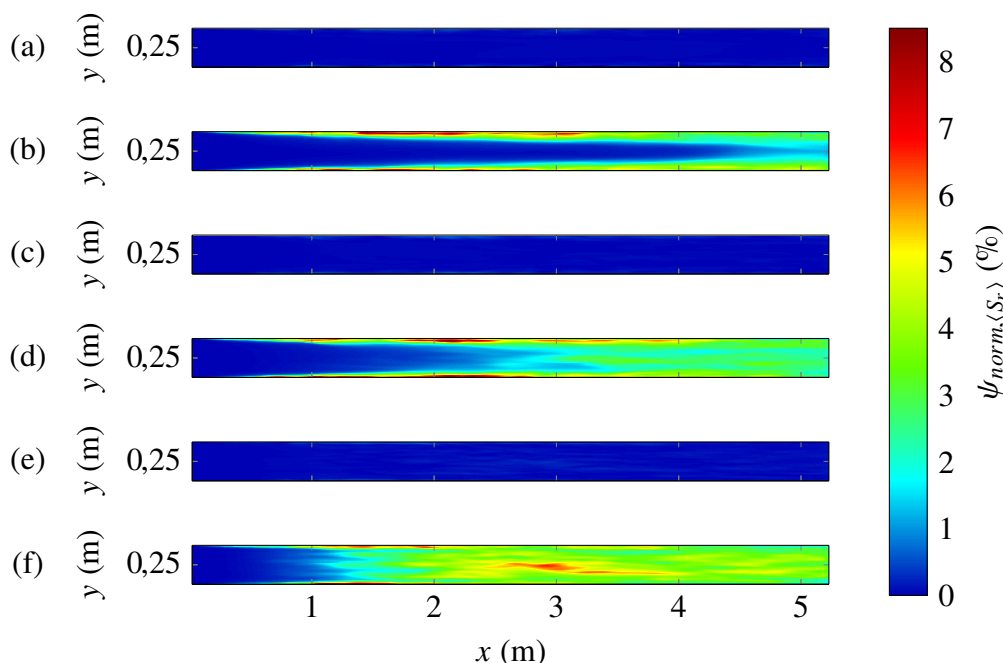


Figura 5.12 – Diferenças normativas de $\langle S_r \rangle$ em relação ao resultado “com TRI” obtidas com a solução “sem TRI simples”, (a), (c) e (e); e com a solução “sem TRI alternativa” (b), (d) e (f).

Planos longitudinais $z = 0,25$ m, (a) e (b); $z = 0,125$ m, (c) e (d); $z = 0,0625$ m, (e) e (f).

Além do argumento físico, a Figura 5.12 e a Tabela 5.2 evidenciam outra razão para optar pela utilização da solução alternativa para a análise da interação turbulência-radiação em termos de $\langle S_r \rangle$. Essa abordagem, quando comparada à solução “sem TRI simples”, resulta consistentemente em maiores diferenças normativas para o termo fonte radiativo médio. Conforme é discutido na próxima subseção, ambas as abordagens que negligenciam o TRI introduzidas neste trabalho são simplificações da solução “sem TRI” real, obtida através da modelagem clássica da turbulência, para a qual espera-se que a diferença percentual em relação à solução “com TRI” seja maior. Assim, parece adequado utilizar, na avaliação da magnitude dos efeitos da interação turbulência-radiação, a solução aproximada para o cálculo “sem TRI” que forneça as maiores diferenças ψ , tanto para o fluxo de calor radiativo como para o termo fonte.

Tabela 5.2 – Diferenças normativas para o termo fonte radiativo médio utilizando a solução “sem TRI simples”.

Modelo espectral	IT (%)	H_2O		CO_2	
		Médio	Máximo	Médio	Máximo
WSGG	0	-	-	0,053	1,118
	5	0,090	0,924	0,068	1,117
	10	0,105	1,118	0,086	1,180
	15	0,120	1,685	0,104	2,035
	20	0,134	2,059	0,121	2,302
	0	0,015	0,382	0,017	0,444
$GG_{\kappa(T)}$	5	0,016	0,401	0,017	0,417
	10	0,017	0,619	0,020	0,510
	15	0,019	0,705	0,025	0,521
	20	0,022	0,870	0,032	0,676
	0	0,084	2,048	0,015	0,441
GG_{κ}	5	0,064	0,961	0,015	0,396
	10	0,073	1,278	0,018	0,462
	15	0,084	2,048	0,024	0,582
	20	0,095	2,244	0,030	0,849

5.2.3 O carácter aproximado das abordagens “sem TRI”

Uma observação importante que deve ser feita antes do fechamento desta seção é que as duas abordagens adotadas no presente estudo para a solução “sem TRI” tratam-se de aproximações do cálculo em que os efeitos da interação turbulência-radiação são negligenciados por completo. Conforme discutido na Seção 2.6, esse cálculo consiste na aplicação da modelagem clássica da turbulência, na qual as equações que regem o problema são resolvidas após a aplicação de médias de Reynolds. Dessa forma, garante-se que a malha computacional resolva apenas as componentes médias dos campos de temperatura, velocidade, pressão, massa específica e concentração química, e que as demais grandezas, como a intensidade de radiação e o termo fonte radiativo, sejam calculadas a partir dessas variáveis médias.

No entanto, por limitações do código numérico empregado nesta dissertação, a metodologia RANS não pôde ser implementada. A alternativa de utilizar-se outro código que adotasse tal modelagem foi descartada, pois não se tinha à disposição um software que aplicasse a mesma modelagem física do FDS – o que é importante para garantir que possíveis diferenças entre os resultados fossem atribuídas apenas ao TRI. Portanto, teve-se que recorrer a metodologias que

obtivessem resultados “sem TRI” aproximados a partir dos dados instantâneos calculados por LES.

No contexto das interações entre turbulência e radiação, a diferença entre essas abordagens aproximadas e a solução RANS está no fato de o TRI ser um fenômeno global e que se acumula sobre o transiente do problema. Ou seja, assim como as médias de temperatura influenciam o campo radiativo médio, este também afeta a temperatura média; assim, para um mesmo problema, tem-se que a temperatura média calculada por RANS, $\langle T \rangle_{nTRI}$, pode acabar sendo diferente da média da temperatura instantânea computada através da simulação de grandes escalas (ou da simulação numérica direta), $\langle T \rangle_{TRI}$. Isso fica evidente em estudos sobre o TRI em escoamentos reativos, nos quais são reportados valores distintos de temperatura de chama dependendo do tipo de cálculo realizado (por exemplo, Mazumder e Modest, 1999a, e Li e Modest, 2002).

Esse efeito não é captado nas abordagens “sem TRI simples” e “sem TRI alternativa”, porque, em ambas, assume-se implicitamente que $\langle T \rangle_{nTRI} = \langle T \rangle_{TRI}$. Uma importante consequência disso é que espera-se que as diferenças relativas entre as soluções “com TRI” e “sem TRI” sejam invariavelmente menores nestes casos do que quando a modelagem RANS é implementada na geração da solução “sem TRI”, independentemente do parâmetro avaliado.

5.3 Discussão sobre diferenças percentuais no TRI

No presente trabalho, a magnitude dos efeitos da interação turbulência-radiação é analisada através da diferença percentual ψ entre resultados médios obtidos incluindo e negligenciando o TRI. Portanto, a maneira como essas diferenças são definidas é de grande importância, uma vez que, dependendo de como são computados, valores relativos podem ser amplificados ou amortecidos, alterando a percepção que se tem sobre a importância do TRI no problema. Infelizmente, embora muitos estudos sobre o tema utilizem diferenças percentuais nas suas análises, é raro encontrar uma especificação sobre qual tipo de diferença está sendo empregada e uma justificativa para a escolha de tal metodologia.

Nesta seção é feita uma discussão sobre a influência do tipo de diferença percentual adotada na avaliação do TRI. Conforme introduzido na Seção 4.4, duas expressões distintas para ψ são propostas: uma diferença relativa simples, ψ_{rel} , dada pela Eq. (4.7), e uma diferença normativa, ψ_{norm} , definida na Eq. (4.8). Ambas envolvem, no seu numerador, diferenças absolutas entre as soluções considerando e negligenciando o TRI; porém, em ψ_{rel} , essa diferença é normalizada pelo valor local da solução “sem TRI”, enquanto em ψ_{norm} a normalização é feita com o maior valor tomado pela solução em todo o conjunto de dados.

Logo, a necessidade de se escolher entre diferenças relativas ou normativas só é importante na análise de grandezas cujos dados compreendam diferentes ordens de magnitude. Caso contrário, o denominador nas duas definições é similar, resultando em pequenas diferenças entre ψ_{rel} e ψ_{norm} . Como é ilustrado na Figura 5.13 para os casos com $IT = 10\%$, valores do fluxo

de calor radiativo médio nas paredes ficam, em geral, na faixa da dezena à centena. Por outro lado, conforme dado na Figura 5.14, que mostra resultados do termo fonte radiativo médio em algumas linhas na direção longitudinal no interior do duto para os mesmos casos da Figura 5.13, $\langle S_r \rangle$ apresenta variações muito mais elevadas. Então, sob essa ótica, as diferenças entre ψ_{rel} e ψ_{norm} são discutidas nesta seção em termos dos resultados para $\langle S_r \rangle$.

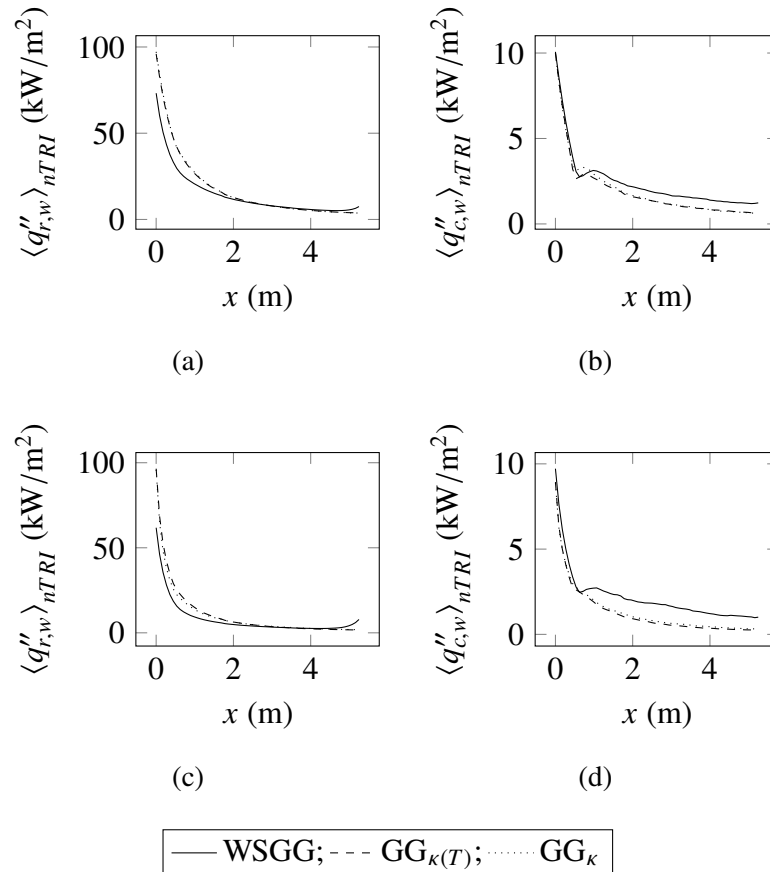


Figura 5.13 – Fluxo de calor médio na solução negligenciando o TRI, com $IT = 10\%$. De cima para baixo, H_2O e CO_2 ; da esquerda para a direita: fluxo radiativo e fluxo convectivo.

A Tabela 5.3 mostra as diferenças relativas de $\langle S_r \rangle$ para todos os casos considerados no presente trabalho. Quando comparada à Tabela 5.1, em que as diferenças normativas do termo fonte radiativo médio para os mesmos casos são apresentadas, fica evidente que $\psi_{rel, \langle S_r \rangle}$ possui um comportamento consideravelmente mais errático e inadequado para a análise. Observam-se diferenças máximas locais entre soluções considerando e negligenciando o TRI de até cerca de $1 \times 10^8\%$, e, mesmo quando uma média de $\psi_{rel, \langle S_r \rangle}$ é realizada sobre todo o domínio computacional, as diferenças chegam a $1 \times 10^3\%$. Nenhum estudo anterior sobre a interação turbulência-radiação, mesmo aqueles em que a modelagem da combustão é incluída, reporta desvios dessa magnitude, de modo que é muito mais provável que tais valores estejam ligados à metodologia adotada do que aos efeitos do TRI.

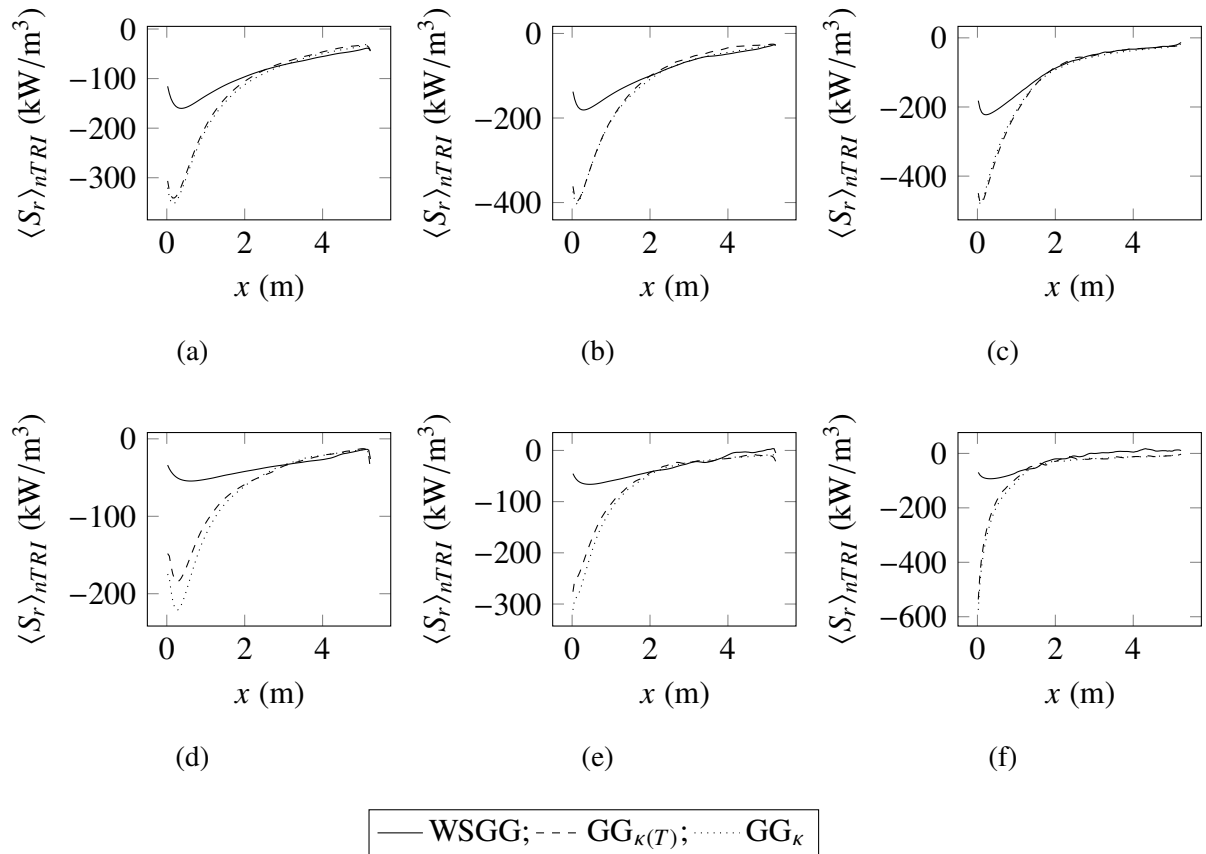


Figura 5.14 – Termo fonte radiativo médio na solução negligenciando o TRI, com $IT = 10\%$. De cima para baixo: H_2O e CO_2 ; da esquerda para a direita, linhas $(y, z) = (0,25 \text{ m}, 0,25 \text{ m})$, $(0,125 \text{ m}, 0,25 \text{ m})$ e $(0,0625 \text{ m}, 0,25 \text{ m})$.

Uma comparação direta entre os dois tipos de diferença é feita na Figura 5.15, para o vapor de água e para o dióxido de carbono, com $IT = 10\%$, ao longo das mesmas linhas longitudinais da Figura 5.14. Nas proximidades da seção de entrada, os valores das diferenças relativa e normativa são similares, o que não é o caso a partir da segunda metade do duto; a explicação para tal comportamento não parece ser trivial e pode ser objeto de futuros estudos. Além disso, embora a diferença entre $\psi_{rel,\langle S_r \rangle}$ e $\psi_{norm,\langle S_r \rangle}$ não seja desprezível na linha de centro do duto (ficando em cerca de 50% na Figura 5.15d, por exemplo), ela é muito nas proximidades das paredes.

Os picos mostrados nos gráficos da Figura 5.15, claramente visíveis nas Figuras 5.15e e 5.15f, ilustram um comportamento de $\psi_{rel,\langle S_r \rangle}$ observado em diversos pontos dentro do domínio computacional para todos os casos analisados, independentemente dos modelos espectrais, das intensidades de turbulência ou das espécies químicas consideradas; ou seja, ao se avaliar a diferença relativa para o termo fonte radiativo médio em uma linha dentro do duto, ou mesmo em uma seção longitudinal do domínio, tem-se, em geral, uma distribuição uniforme, entrecortada por picos esporádicos de grande amplitude. A princípio, esse comportamento irregular de $\psi_{rel,\langle S_r \rangle}$ poderia ser atribuído a uma distribuição igualmente intermitente da diferença absoluta $\psi_{abs,\langle S_r \rangle} =$

Tabela 5.3 – Diferenças percentuais relativas para o termo fonte radiativo médio com o vapor de água e o dióxido de carbono.

Modelo espectral	IT (%)	H_2O		CO_2	
		Médio	Máximo	Médio	Máximo
WSGG	0	-	-	1209,226	$9,849 \times 10^7$
	5	18,637	$6,786 \times 10^5$	636,494	$1,653 \times 10^7$
	10	18,680	$2,476 \times 10^5$	671,794	$1,011 \times 10^7$
	15	16,946	$2,555 \times 10^5$	861,994	$2,419 \times 10^7$
	20	21,927	$4,441 \times 10^5$	1214,126	$4,714 \times 10^7$
$GG_{\kappa(T)}$	0	3,087	$2,716 \times 10^4$	21,200	$1,489 \times 10^5$
	5	4,121	$1,126 \times 10^5$	25,814	$1,629 \times 10^5$
	10	3,211	$1,686 \times 10^4$	43,791	$2,804 \times 10^6$
	15	3,838	$3,489 \times 10^4$	73,851	$6,785 \times 10^6$
	20	3,500	$1,379 \times 10^4$	55,276	$3,513 \times 10^6$
GG_{κ}	0	20,244	$5,616 \times 10^5$	8,115	$9,236 \times 10^4$
	5	13,388	$1,545 \times 10^5$	8,493	$1,429 \times 10^4$
	10	17,021	$2,868 \times 10^5$	10,777	$1,929 \times 10^5$
	15	20,244	$5,616 \times 10^5$	12,874	$2,182 \times 10^5$
	20	21,448	$2,644 \times 10^5$	13,997	$1,275 \times 10^5$

$|\langle S_r \rangle_{TRI} - \langle S_r \rangle_{nTRI}|$ que, por alguma razão, não é captada também por $\psi_{norm, \langle S_r \rangle}$. Entretanto, conforme a Figura 5.16 mostra, para as mesmas linhas das figuras anteriores, este não é o caso.

Assim, o comportamento errático de $\psi_{rel, \langle S_r \rangle}$ deve ser atribuído ao valor local de $\langle S_r \rangle_{nTRI}$, presente no denominador da definição dessa diferença, Eq. (4.7). Como o termo fonte radiativo médio é um campo cujos valores abrangem diferentes magnitudes, quando $\langle S_r \rangle_{nTRI}$ é muito pequeno, o valor local de $\psi_{rel, \langle S_r \rangle}$ acaba sendo artificialmente aumentado, e, de forma recíproca, quando $\langle S_r \rangle_{TRI}$ é muito elevado, tem-se uma amortização da diferença relativa. O resultado desse efeito é que o pós-processamento das soluções para o termo fonte radiativo através de diferenças relativas torna a análise do TRI impraticável.

Para melhor explicar esse comportamento, é feita aqui uma breve análise das diferenças percentuais encontradas em um caso específico das Tabelas 5.1 e 5.3. Toma-se como exemplo o caso simulado com o modelo da soma-ponderada-dos-gases-cinza, com o dióxido de carbono e intensidade de turbulência nula, para o qual obteve-se o maior valor local de $\psi_{rel, \langle S_r \rangle}$. Esse valor, de quase 1×10^8 %, foi obtido no ponto com coordenadas $(x, y, z) = (2,49 \text{ m}, 0,13 \text{ m}, 0,03 \text{ m})$. Nessa localidade, embora os valores do termo fonte radiativo médio “com TRI” e “sem TRI” sejam muito distintos, resultando em uma diferença

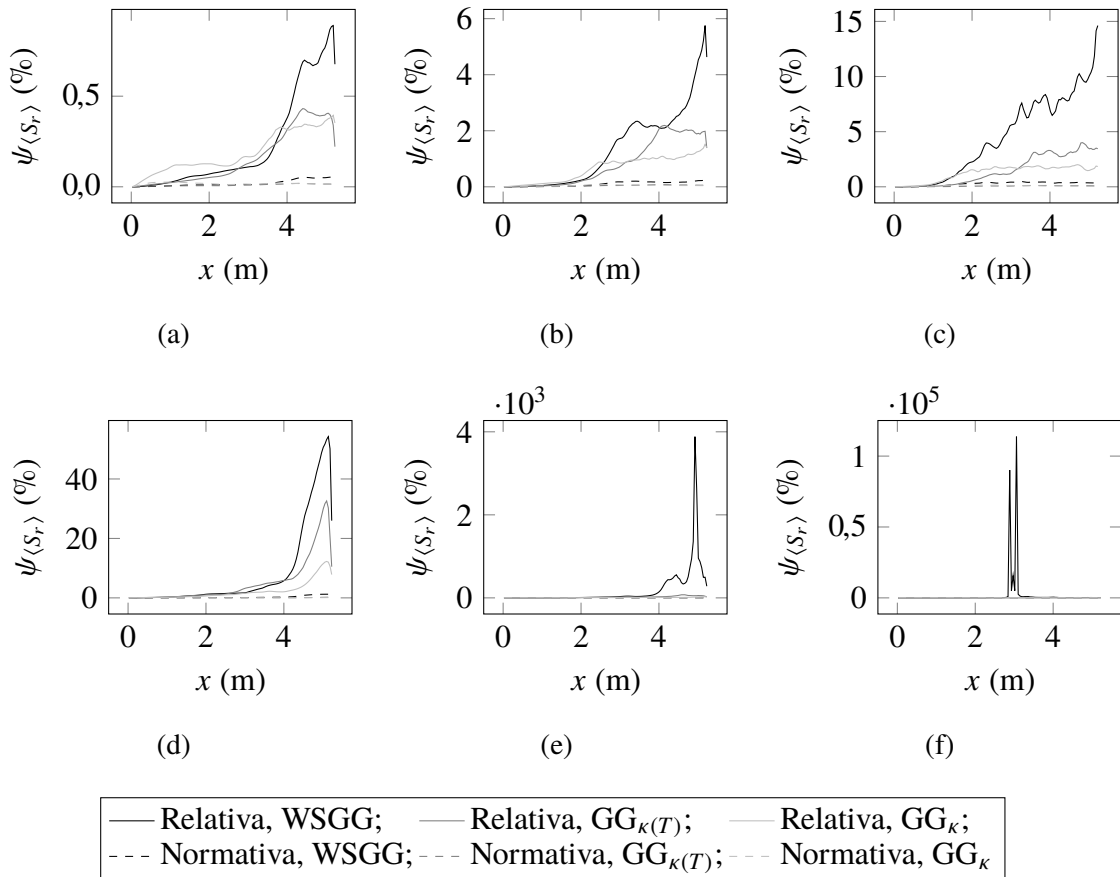


Figura 5.15 – Diferenças percentuais relativas e normativas para $\langle S_r \rangle$, com $IT = 10\%$. De cima para baixo: H_2O e CO_2 ; da esquerda para a direita, linhas $(y, z) = (0,25 \text{ m}, 0,25 \text{ m})$, $(0,125 \text{ m}, 0,25 \text{ m})$ e $(0,0625 \text{ m}, 0,25 \text{ m})$.

absoluta local de quase $16,9 \text{ kW/m}^3$, essa diferença é, ainda assim, pequena quando comparada ao valor máximo do termo fonte em todo o domínio computacional. Isso é evidenciado pelo fato de a diferença percentual normativa ser de apenas $2,83\%$ nesse ponto. Portanto, o valor excessivamente elevado da diferença relativa local deve ser atribuído ao resultado muito pequeno obtido para $\langle S_r \rangle_{nTRI}$ no ponto em questão (de aproximadamente $1,71 \times 10^{-5} \text{ kW/m}^3$), que, por aparecer no denominador da definição de $\psi_{rel, \langle S_r \rangle}$, Eq. (4.7), causa um aumento no valor dessa grandeza.

Não foi possível determinar uma razão para um resultado de $\langle S_r \rangle_{nTRI}$ tão reduzido nesse ponto. Uma hipótese é que se trata de uma anomalia numérica do código ligada ao tratamento adotado para a transferência de calor na vizinhança de superfícies sólidas, uma vez que comportamentos similares são observados em todos os casos simulados, nas proximidades das paredes dos dutos. De qualquer forma, o fato é que se trata de um valor pontual atípico para o termo fonte radiativo “sem TRI”, que resulta em um valor extremamente elevado de $\psi_{rel, \langle S_r \rangle}$ apenas nessa localidade. Mesmos nos pontos imediatamente vizinhos, tal comportamento não é observado e a diferença relativa cai diversas ordens de magnitude. Isso é ilustrado na Figura 5.17,

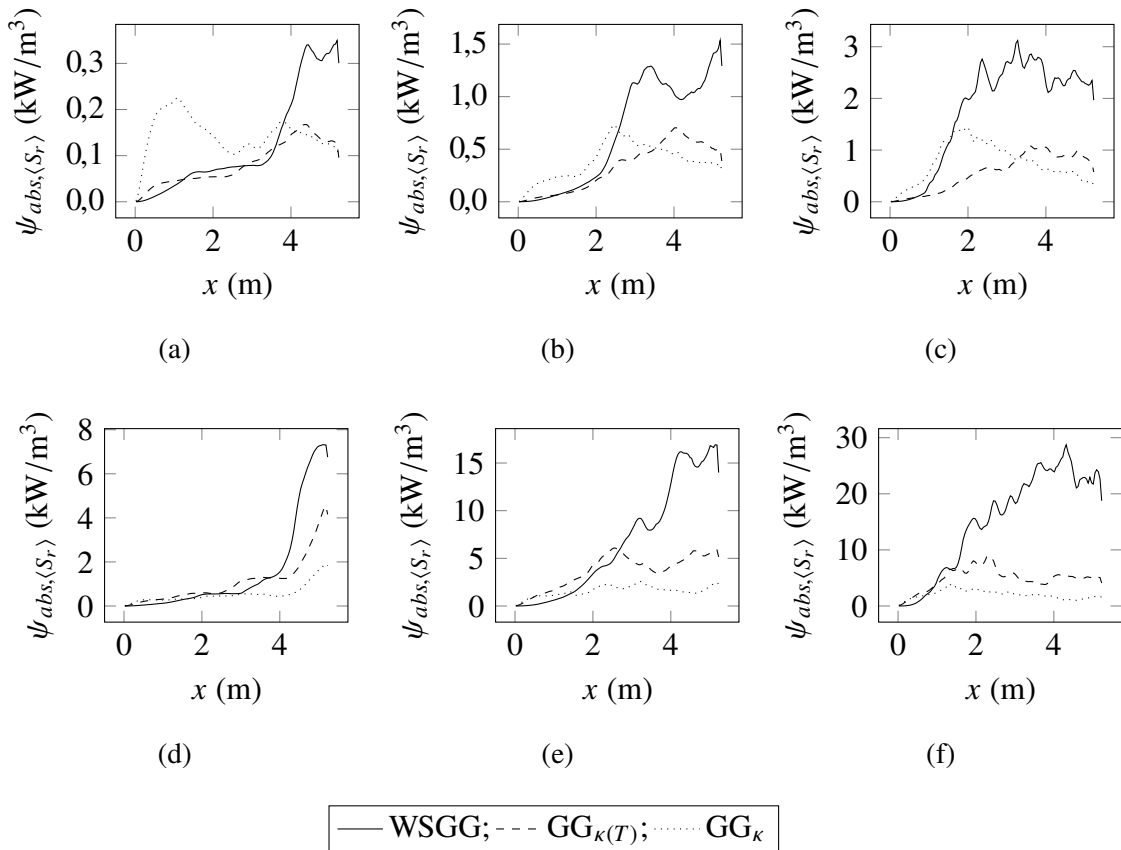


Figura 5.16 – Diferenças percentuais absolutas para $\langle S_r \rangle$, com $IT = 10\%$. De cima para baixo: H_2O e CO_2 ; da esquerda para a direita, linhas $(y, z) = (0,25 \text{ m}, 0,25 \text{ m})$, $(0,125 \text{ m}, 0,25 \text{ m})$ e $(0,0625 \text{ m}, 0,25 \text{ m})$.

que mostra a distribuição de $\psi_{rel,\langle S_r \rangle}$ nos arredores do ponto $(2,49 \text{ m}, 0,13 \text{ m}, 0,03 \text{ m})$ para o caso discutido, tanto no plano xy (Figura 5.17a) como no plano xz (Figura 5.17b).

Apesar de, conforme a Tabela 5.3, todos os casos considerados apresentarem valores locais muito altos para a diferença relativa do termo fonte radiativo médio, cada um desses resultados pode ser explicado, sem exceção, como o efeito de valores locais de $\langle S_r \rangle_{nTRI}$ próximos de zero. Evidentemente, em cada caso simulado, outros máximos locais pontuais, porém de menores magnitudes, foram encontrados ao longo do domínio; tais máximos locais contribuem, em conjunto, para aumentar o valor médio de $\psi_{rel,\langle S_r \rangle}$ mostrado na Tabela 5.3. Contudo, esses máximos consistem também de picos esporádicos restritos a uma localidade muito pequena dentro do domínio de cálculo, e que não parecem afetar o restante do campo de diferenças relativas, mesmo nas suas vizinhanças mais próximas.

Um último ponto a ser tratado nesta seção diz respeito à interpretação física dessas diferenças no contexto da interação turbulência-radiação. O TRI é definido como uma diferença entre médias de resultados instantâneos (abordagem “com TRI”) e resultados calculados a partir de variáveis médias (abordagem “sem TRI”). Dessa interpretação, seria suficiente a utilização da diferença absoluta para a análise de todas as grandezas de interesse; no entanto, é difícil

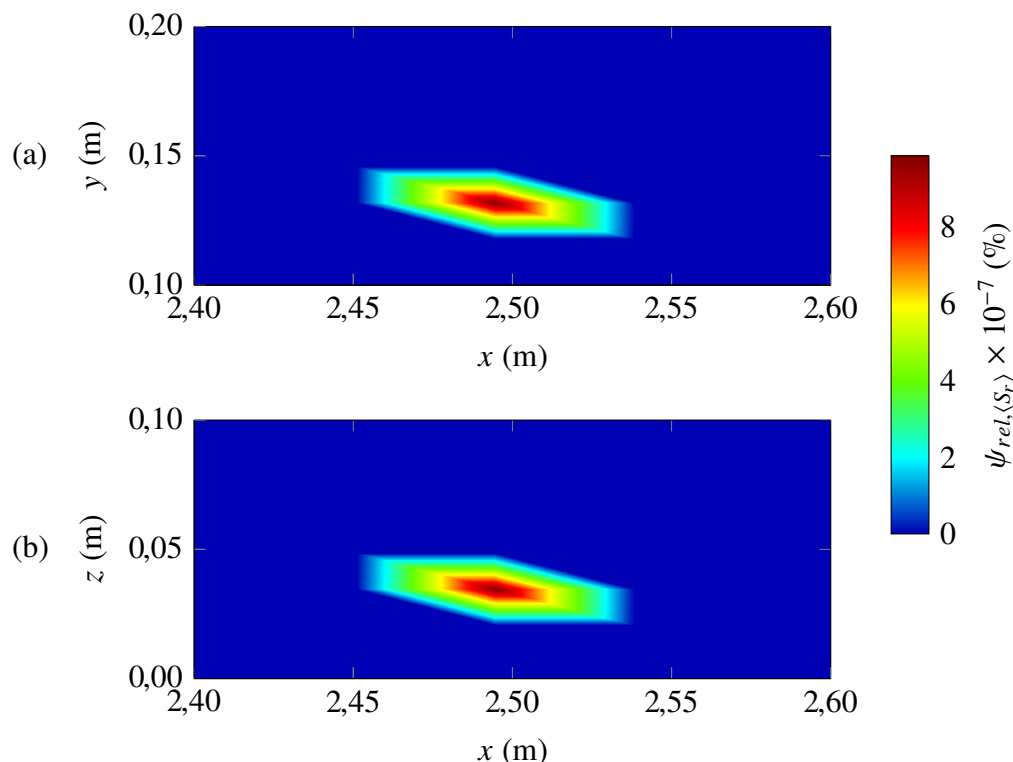


Figura 5.17 – Diferença relativa do termo fonte radiativo médio nas vizinhanças do ponto de máximo local de $\psi_{rel,(S_r)}$ para o caso com o modelo WSGG, CO_2 e $IT = 0\%$, nos planos xy (a) e xz (b).

avaliar a importância relativa do TRI no problema através de ψ_{abs} . Um exemplo que ilustra a inconveniência de se empregar essa metodologia é a análise do TRI em dois casos nos quais as temperaturas do escoamento são muito diferentes: o caso com temperatura mais alta, por ter, em geral, fluxo de calor e termo fonte radiativo de maiores magnitudes, também irá apresentar valores mais elevados de ψ_{abs} do que no caso com menor temperatura, porém isso não pode ser necessariamente atribuído a um maior efeito das interações entre turbulência e radiação no problema.

É para contornar esse tipo de dificuldade que se divide a diferença absoluta por alguma grandeza característica do problema. A diferença entre ψ_{rel} e ψ_{norm} está justamente em qual grandeza é escolhida; em ψ_{rel} , a diferença absoluta de determinada grandeza é comparada ao valor local desta (obtida pelo cálculo que negligencia o TRI), enquanto, em ψ_{norm} , essa comparação é feita em termos do valor máximo da grandeza em toda a amostragem. Assim, diferenças relativas são mais adequadas na avaliação de grandezas pontuais, ao passo que diferenças normativas são apropriadas para a análise de campos inteiros, em que se tem interesse em uma visão geral do comportamento do TRI no problema.

Por isso, nesta dissertação, optou-se por empregar ψ_{rel} na análise dos fluxos de calor médios, os quais são tomados em apenas alguns pontos ao longo das paredes. Por outro lado, para o campo tridimensional do termo fonte radiativo médio, ψ_{norm} é adotado, de modo que os

efeitos locais do TRI são sempre comparados aos valores máximos deste campo.

Evidentemente, outros tipos de diferenças podem ser definidas, principalmente através da escolha de outro valor para o denominador nas Eqs. (4.7) e (4.8) – como, por exemplo, a média aritmética de ϕ em todo o conjunto de dados. Porém, testes preliminares mostraram pouca diferença entre metodologias alternativas para a determinação de ψ e as abordagens discutidas nesta seção, de modo que elas não são tratadas no presente trabalho.

5.4 A correção para o termo fonte no modelo WSGG

Dentre os modelos espectrais implementados nesta dissertação, o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza é o de maior importância no contexto da análise da interação turbulência-radiação, por permitir a consideração da variação espectral das propriedades radiativas do meio e por ter apresentado, em seus resultados, os efeitos mais significativos do TRI. Portanto, é interessante aprofundar o estudo do fenômeno aplicado a essa modelagem.

Um objetivo de muitas das investigações sobre a interação turbulência-radiação é a elaboração de metodologias que permitam eliminar ou reduzir os desvios entre resultados médios considerando e negligenciando o TRI. Isso pode ser feito de diversas maneiras, como pela análise das correlações que surgem da aplicação de médias temporais às expressões que regem a troca de energia radiativa (com o propósito de determinar quais termos podem ser desprezados sem perda considerável de informação); exemplos de trabalhos que realizam esse tipo de estudo incluem os estudos de Coelho, 2002, Li e Modest, 2002, Coelho, 2004, e Poitou et al., 2012, entre outros. Alternativamente, podem ser propostos fatores ou equações adicionais que permitam contabilizar artificialmente as contribuições do TRI, sem a necessidade de se realizar cálculos transientes – isso é feito em Snegirev, 2004, por exemplo.

Nesta seção, introduz-se uma investigação inicial deste último tipo para o TRI no modelo WSGG. O objetivo é determinar a expressão para uma função de correção f_Q a partir da qual, quando aplicada à solução obtida negligenciando o TRI, resulte na solução que considera os efeitos do fenômeno, conforme exemplificado pela Eq. (5.1). Por ora, a viabilidade do cálculo dessa função a partir das grandezas médias calculadas diretamente na modelagem RANS não está em discussão.

$$\langle \phi \rangle_{TRI} = f_Q (\langle \phi \rangle_{nTRI}) \quad (5.1)$$

Nesta dissertação, escolhe-se uma função de correção tal que, quando adicionada à solução “sem TRI”, leve ao valor da solução “com TRI” – ou seja, na Eq. (5.1), $f_Q (\langle \phi \rangle_{nTRI}) = \langle \phi \rangle_{nTRI} + Q$, onde Q é chamado aqui de fator de correção. Além disso, a análise apresentada nesta seção baseia-se no termo fonte radiativo médio, isto é, $\langle \phi \rangle = \langle S_r \rangle$; no entanto, a mesma metodologia pode ser empregada, com pequenas modificações, para o fluxo de calor médio ou

até mesmo para a forma média da RTE.

Portanto, o fator de correção proposto aqui consiste em um campo tridimensional, tal que

$$\varrho(\mathbf{x}) = \langle S_r(\mathbf{x}) \rangle_{TRI} - \langle S_r(\mathbf{x}) \rangle_{nTRI} \quad (5.2)$$

onde $\langle S_r \rangle_{TRI}$ e $\langle S_r \rangle_{nTRI}$ são dados pelas Eqs. (2.53) e (2.54), respectivamente.

Após algumas manipulações algébricas, pode-se reescrever ϱ como uma função apenas da temperatura local (média e flutuação) e dos coeficientes do modelo WSGG, conforme a Eq. (5.3). Nesta equação, assim como nas posteriores, a dependência das variáveis com a posição é suprimida.

$$\varrho = 4\sigma\kappa_g \sum_{g=0}^{N_G} \sum_{k=1}^{N_K} b_{k,g} \left[\langle T \rangle^{k+3} - \langle (\langle T \rangle + T')^{k+3} \rangle \right] \quad (5.3)$$

Uma dificuldade dessa equação é a avaliação da média temporal do segundo termo dentro dos colchetes. Mais conveniente é a expansão do binômio e sua simplificação, que levam à forma final para o fator de correção do termo fonte radiativo médio, escrita em função apenas de potências das médias temporais e de momentos centrais de temperatura:

$$\varrho = -4\sigma\kappa_g \sum_{g=0}^{N_G} \sum_{k=1}^{N_G} b_{k,g} C_k \quad (5.4)$$

onde, para o modelo WSGG com quatro gases cinza, os coeficientes C_k são dados por

$$C_1 = 6\langle T \rangle^2 \langle T'^2 \rangle + 4\langle T \rangle \langle T'^3 \rangle + \langle T'^4 \rangle \quad (5.5)$$

$$C_2 = 10\langle T \rangle^3 \langle T'^2 \rangle + 10\langle T \rangle^2 \langle T'^3 \rangle + 5\langle T \rangle \langle T'^4 \rangle + \langle T'^5 \rangle \quad (5.6)$$

$$C_3 = 15\langle T \rangle^4 \langle T'^2 \rangle + 20\langle T \rangle^3 \langle T'^3 \rangle + 15\langle T \rangle^2 \langle T'^4 \rangle + 6\langle T \rangle \langle T'^5 \rangle + \langle T'^6 \rangle \quad (5.7)$$

$$C_4 = 21\langle T \rangle^5 \langle T'^2 \rangle + 35\langle T \rangle^4 \langle T'^3 \rangle + 35\langle T \rangle^3 \langle T'^4 \rangle + 21\langle T \rangle^2 \langle T'^5 \rangle + 7\langle T \rangle \langle T'^6 \rangle + \langle T'^7 \rangle \quad (5.8)$$

$$C_5 = 28\langle T \rangle^6 \langle T'^2 \rangle + 56\langle T \rangle^5 \langle T'^3 \rangle + 70\langle T \rangle^4 \langle T'^4 \rangle + 56\langle T \rangle^3 \langle T'^5 \rangle + 28\langle T \rangle^2 \langle T'^6 \rangle + 8\langle T \rangle \langle T'^7 \rangle + \langle T'^8 \rangle \quad (5.9)$$

Como ilustração, a Figura 5.18 mostra os perfis do fator de correção, calculados através da Eq. (5.4), ao longo de três planos longitudinais do duto, para o dióxido de carbono no modelo WSGG com $IT = 10\%$. Quando esses perfis são somados aos perfis do termo fonte radiativo médio obtido na abordagem “sem TRI”, $\langle S_r \rangle_{nTRI}$, o resultado é uma distribuição idêntica à do termo fonte radiativo médio “com TRI”, $\langle S_r \rangle_{TRI}$. Comprova-se, assim, que o fator de correção proposto satisfaz a condição inicialmente estabelecida para f_ϱ na Eq. (5.1).

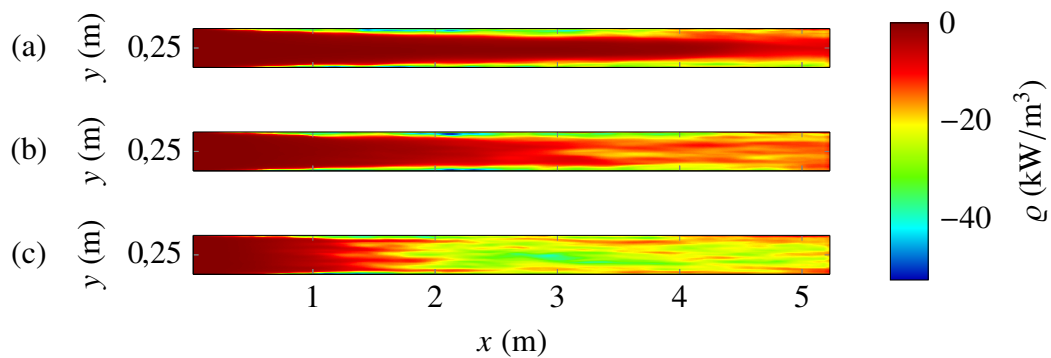


Figura 5.18 – Campo do fator de correção ϱ para o termo fonte radiativo médio no modelo WSGG com o CO_2 e $IT = 10\%$, em três planos longitudinais do duto: $z = 0,25$ m (a), $z = 0,125$ m (b), e $z = 0,0625$ m (c).

Essa identidade é atendida globalmente para o termo fonte radiativo médio – isto é, em cada ponto do domínio verifica-se que $\langle S_r \rangle_{TRI} = \langle S_r \rangle_{nTRI} + \varrho$ – em todos os casos submetidos com o modelo WSGG. Entretanto, deve-se ressaltar que isso só é observado quando adota-se a solução “sem TRI alternativa”. Conforme discutido na Seção 5.2, com a solução “sem TRI simples” as intensidades locais médias presentes no lado direito das Eqs. (2.53) e (2.54) não são iguais, de modo que a dedução do fator de correção se torna muito mais complexa, fugindo do escopo deste trabalho.

Ainda assim, o fator de correção proposto na Eq. (5.4) poderia, em teoria, ser aplicado para a correção de valores de $\langle S_r \rangle_{nTRI}$ computados com a modelagem clássica da turbulência, resultando em um valor (ou um campo) para o termo fonte radiativo médio idêntico àquele calculado a partir das grandezas instantâneas. Infelizmente, essa não é uma implementação viável em aplicações práticas, pois, para a determinação de ϱ , são necessárias informações das flutuações instantâneas de temperatura, que só podem ser obtidas da solução do transiente do problema.

Portanto, a expressão para ϱ não deve ser vista como um fator de correção a ser combinado à solução “sem TRI” para, a partir dela, conseguir-se a solução “com TRI”, mas sim como uma

expressão para a diferença entre $\langle S_r \rangle$ calculado com e sem a inclusão dos efeitos do TRI, dada em termos apenas das médias e dos momentos centrais de temperatura. Pode-se, então, conduzir uma análise de sensibilidade nos termos dessa equação, assim como é feita para a RTE média nos estudos de Coelho, 2002, Li e Modest, 2002, Coelho, 2004, e Poitou et al., 2012, já citados nesta seção: por exemplo, é possível avaliar, na Eq. (5.4), a importância individual de cada um dos termos C_k sobre o valor total de ρ em diversos casos, combinando-se diferentes espécies químicas, intensidades de turbulência, números de Reynolds ou quaisquer outros parâmetros que possam influenciar o TRI. A partir disso, pode-se ter um melhor entendimento de como a interação turbulência-radiação se comporta em diversos tipos de problema, pelo menos em termos dos resultados para $\langle S_r \rangle$. Mais ainda, como fatores de correção semelhantes ao da Eq. (5.4) podem ser derivados para o fluxo de calor radiativo ou até para a equação da transferência radiativa, um procedimento similar também pode ser realizado para a análise dessas grandezas.

Uma limitação da Eq. (5.4) e de quaisquer outras expressões deduzidas de forma parecida é que elas são válidas somente para meios constituídos de uma única espécie química. Isso é uma grande desvantagem para a análise do TRI em escoamentos reativos, em que a composição do meio se altera tanto no espaço como no tempo. A Eq. (5.4) pode ser adaptada sem muitas dificuldades para um meio não homogêneo no qual as concentrações químicas não variam no tempo, porém, quando este não for o caso, o fator de correção não pode mais ser expresso em termos apenas da temperatura média e de suas flutuações; deve-se incorporar também, de alguma forma, as variações temporais da concentração das espécies químicas (ou das suas pressões parciais), que têm impacto sobre o coeficiente de absorção, conforme as Eqs. (2.53) e (2.54).

Apesar disso, neste caso a ideia introduzida nos parágrafos anteriores ainda pode ser aplicada. Assumindo-se um comportamento para a dependência do coeficiente de absorção com a pressão parcial das espécies, pode-se deduzir uma nova expressão para o fator de correção, de forma que este parâmetro ainda represente a diferença entre as soluções “com TRI” e “sem TRI”; então, análises de sensibilidade dos termos resultantes dessa equação podem ser conduzidas. Contudo, essas análises não foram conduzidas nesta dissertação, e ficam como sugestões para trabalhos futuros.

6 CONCLUSÕES

Esta dissertação apresentou um estudo de caráter fundamental sobre as interações entre turbulência e radiação em um escoamento não reativo de um gás participante que se desenvolve no interior de um duto de seção transversal retangular. Foi avaliado como a consideração ou não da dependência espectral das propriedades radiativas do meio influencia na magnitude do TRI no problema, através da implementação dos modelos do gás cinza e da soma-ponderada-de-gases-cinza. Além disso, a importância desse fenômeno também foi analisada para cinco valores distintos de intensidade de turbulência do escoamento na entrada do duto e para duas diferentes espécies químicas constituintes do fluido de trabalho.

Essas análises foram realizadas a partir de dados obtidos com simulações no código numérico de volumes finitos *Fire Dynamics Simulator*, que resolve as equações fundamentais através da modelagem LES em uma formulação apropriada para escoamentos compressíveis com baixos números de Mach. Diferentes metodologias para a avaliação da importância do TRI sobre resultados do fluxo de calor médio e do termo radiativo médio foram introduzidas e testadas. Ao final, propôs-se ainda uma expressão para a diferença entre as soluções “com TRI” e “sem TRI” no contexto do modelo WSGG, em função das potências das médias temporais e dos momentos centrais de temperatura.

De maneira geral, encontrou-se que a contribuição global do TRI para o problema é pequena, independentemente da intensidade de turbulência, do gás participante ou do modelo espectral empregados. Em todos os casos analisados, diferenças relativas entre os fluxos médios de calor obtidos considerando e negligenciando o TRI ficaram em menos de 2 %. Para o termo fonte radiativo médio, encontraram-se diferenças normativas locais de até quase 20 %; porém, quando essas diferenças foram computadas sobre todo o domínio computacional, o valor máximo observado foi inferior a 4 %. Esses resultados concordam com o que é reportado na literatura sobre a interação turbulência-radiação em escoamentos não reativos [Mazumder e Modest, 1999b; Gupta et al., 2009; Velasco, 2014].

Na comparação dos diferentes modelos espectrais, verificou-se o comportamento esperado, de acordo com trabalhos como o de Hall e Vranos, 1994, que a inclusão ou não da variação espectral na avaliação das propriedades radiativas do meio tem efeitos significativos sobre a magnitude do TRI. No problema analisado, encontrou-se que, quando a dependência espectral é considerada, o TRI tem um impacto maior sobre os resultados. Entretanto, não se pode afirmar que esse comportamento é universal, independentemente do caso em análise, mas apenas que, para a aferição correta da magnitude do fenômeno, a variação espectral das propriedades radiativas deve ser levada em conta na solução da RTE.

A avaliação do TRI para diferentes intensidades de turbulência comprovou que os efeitos do fenômeno são promovidos por maiores magnitudes de flutuações. Quanto à influência da composição do meio, observou-se que a interação turbulência-radiação é mais relevante no

dióxido de carbono do que no vapor de água. Dentre as duas abordagens implementadas para a hipótese do gás cinza, um comportamento interessante encontrado foi que, quando empregou-se o CO_2 , o TRI foi mais significativo no modelo $\text{GG}_{\kappa(T)}$, em que o coeficiente de absorção é uma função da temperatura local, do que no modelo GG_{κ} , para o qual κ é constante em todo o domínio de cálculo; essa tendência foi inversa para o H_2O . A explicação para isso está na forma como o coeficiente de absorção de cada espécie se correlaciona com a intensidade de corpo negro.

Duas formas de inicializar a solução “sem TRI” foram propostas e avaliadas neste trabalho. Na primeira, seguindo uma abordagem corrente na literatura, o campo de temperatura médio, determinado a partir dos dados de saída de um cálculo LES, é utilizado na inicialização de uma nova simulação independente. Na segunda abordagem, por sua vez, o campo médio de intensidade de radiação é empregado, juntamente ao campo de $\langle T \rangle$, para essa inicialização; pelo que se pesquisou em estudos anteriores sobre o TRI, esta última metodologia é inédita em análises do fenômeno.

Verificou-se que predições teóricas da aplicação desses dois tipos de solução sobre os fluxos de calor médio nas paredes concordam com resultados obtidos para estas grandezas nas simulações realizadas, atestando que as abordagens foram implementadas de forma correta no presente trabalho. Na avaliação do termo fonte radiativo médio desconsiderando os efeitos do TRI, optou-se por utilizar a solução “sem TRI alternativa”, por ela resultar nos maiores desvios em relação ao resultado “com TRI”, possivelmente aproximando-se mais das diferenças que seriam encontradas na comparação com resultados de simulações RANS.

Também foi objeto de análise a maneira como a diferença percentual entre as soluções “com TRI” e “sem TRI” é computada. A diferença relativa simples, na qual a diferença absoluta entre as duas soluções é comparada em cada ponto ao valor local da solução que desconsidera o TRI, mostrou ser mais adequada para grandezas locais; assim, ψ_{rel} foi utilizada para o pós-processamento de resultados do fluxo de calor médio (por convecção e por radiação), tomado ao longo de diversas linhas nas superfícies do duto. Por outro lado, a diferença normativa, em que o valor absoluto entre os resultados com e sem TRI é comparado ao valor máximo da série de dados, é apropriada para a análise de campos tridimensionais que envolvam diversas ordens de magnitude de uma mesma grandeza; por essa razão, ela foi aplicada para o pós-processamento de resultados do termo fonte radiativo médio.

Finalmente, na última seção de resultados deste trabalho, introduziu-se um fator de correção para $\langle S_r \rangle_{nTRI}$ no modelo WSGG para um meio homogêneo. Esse fator de correção ϱ é definido como a diferença entre as médias do termo fonte radiativo obtidas nos cálculos que consideram e que negligenciam o TRI, e é escrito apenas em função das potências das médias de temperatura e de seus momentos centrais. A validade de ϱ foi verificada através de sua aplicação nas soluções “sem TRI” de todos os casos simulados com o modelo WSGG, que resultou em campos de $\langle S_r \rangle$ idênticos aos das soluções “com TRI” correspondentes. No entanto, ainda é necessário o aprofundamento das discussões sobre esse fator de correção, que fica

como sugestão para trabalhos futuros. Assim, limitou-se a propor maneiras como, em estudos futuros, ρ poderia ser utilizado para investigar o comportamento das interações entre turbulência e radiação.

Portanto, embora tenha-se concluído que a interação turbulência-radiação não tem papel importante nos casos considerados, o estudo desenvolvido nesta dissertação permitiu um melhor entendimento sobre o fenômeno. Isso é muito positivo no sentido de avançar o conhecimento sobre o tema dentro do grupo de estudos no qual o presente trabalho está inserido, o laboratório de radiação térmica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Além disso, na pesquisa realizada teve-se a oportunidade de desenvolver um código numérico próprio, a partir de modificações no código base do FDS – como, por exemplo, a implementação do modelo WSGG. Esse código pode ser aprimorado e utilizado em estudos futuros, tanto dentro como fora do grupo de estudos.

6.1 Sugestões de trabalhos futuros

A pesquisa realizada nesta dissertação pode motivar e servir de base para uma série de novos trabalhos sobre o TRI. Nesta seção, algumas sugestões para estudos futuros são apresentadas.

O passo seguinte mais lógico para dar continuidade ao presente estudo é aplicar a metodologia e o código numérico empregados neste trabalho em escoamentos que incluíssem reações químicas. Nesses problemas, por apresentarem flutuações mais intensas de temperatura e concentração química, é esperado que o TRI tenha maior importância [Mazumder e Modest, 1999a; Coelho, 2007].

Seria interessante também substituir as abordagens adotadas para obter a solução “sem TRI” por cálculos RANS verdadeiros. Porém, isso exigiria alguns cuidados para manter a validade das comparações, pois teria de se garantir que a simulação RANS implementasse a mesma modelagem física (isto é, os mesmos modelos para a solução da radiação térmica e para a combustão, por exemplo) que o cálculo LES utilizado para a geração da solução “com TRI”. Além disso, a adoção de um código numérico (ou até de um software comercial) mais sofisticado, que possuísse uma metodologia avançada para a geração da malha espacial, permitiria a consideração de geometrias não retilíneas para o estudo do TRI – por exemplo, a análise de escoamentos, reativos ou não, em dutos circulares, ou a simulação de chamas livres.

Outra adição relevante para o presente estudo é a análise do TRI no escoamento de gases não homogêneos, compostos, por exemplo, de misturas de dióxido de carbono e vapor de água, o que aproximaria mais as simulações de situações reais de engenharia. Uma vantagem desse tipo de investigação é que, para certos tipos de misturas de gases com frações específicas entre as concentrações químicas das espécies, já estão disponíveis na literatura correlações para o modelo espectral da soma-ponderada-de-gases-cinza para as quais são reportados ótima concordância com resultados linha-por-linha (por exemplo, Kangwanpongpan et al., 2012 e Dorigon et al.,

2013); mesmo para escoamentos com frações variáveis entre as pressões parciais das espécies químicas constituintes, técnicas para permitir a implementação do modelo WSGG têm sido recentemente desenvolvidas [Johansson et al., 2011; Cassol et al., 2014]. Além disso, com a adoção de modelos adequados, pode-se estudar também o TRI em escoamentos com a presença de fuligem.

Neste trabalho, assumiu-se que o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza é capaz de contabilizar de forma satisfatória as variações espectrais das propriedades radiativas do vapor de água e do dióxido de carbono. Embora existam estudos que apontem para a validade de tal consideração (por exemplo, Kangwanpongpan et al., 2012, e Dorigon et al., 2013), uma possibilidade para trabalhos futuros é a implementação nas simulações numéricas de modelos espectrais mais sofisticados, como o modelo SLW [Denison e Webb, 1993] ou o próprio método linha-por-linha [Taine, 1983], como forma de validar os resultados encontrados com o WSGG.

Um parâmetro importante na descrição da turbulência é o número de Reynolds, cuja influência sobre o TRI não foi estudada neste trabalho. Uma investigação tendo como foco esse número adimensional poderia ser conduzida de forma similar ao procedimento adotado para a intensidade de turbulência – ou seja, escoamentos com números de Reynolds de diferentes magnitudes podem ser simulados e, através da comparação de grandezas médias obtidas nos cálculos que consideram e que negligenciam o TRI, a importância de Re sobre a interação turbulência-radiação pode ser analisada. Invariavelmente, para a solução de escoamentos com Re muito elevados, tais simulações exigiriam malhas mais refinadas e menores passos de tempo, que implicariam em um aumento significativo do custo computacional.

Finalmente, conforme comentário na Seção 5.4, o fator de correção ϱ introduzido para o termo fonte radiativo “sem TRI” pode ser objeto de estudos de sensibilidade, buscando determinar quais dos seus termos são importantes e quais podem ser negligenciados.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Aider, J-L.; Danet, A. Large-eddy simulation study of upstream boundary conditions influence upon a backward-facing step flow, **Comptes Rendus Mécanique**, v. 334, n. 7, p. 447–453, 2006.

Amin, M.; Foster, P.J. Fluctuations in the transmittance of a turbulent propane jet flame, **Combustion Institute, European Symposium**, p. 530–535, 1973.

Anderson, J.D. Jr. **Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications**, McGraw-Hill, United States of America, 1995.

Baum, H.R.; Mell, W.E. Radiation and velocity fields induced by localized temperature fluctuations, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 28, p. 473–479, 2000.

Barlow, R.S.; Frank, J.H. Effects of turbulence on species mass fractions in methane/air jet flames, **Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion**, v. 27, n. 1, p. 1087–1095, 1998.

Bejan, A. **Convection Heat Transfer**, 3rd edition, John Wiley & Sons, United States of America, 2004.

Bendat, J.S.; Piersol, A.G. **Random Data – Analysis and Measurements Procedures**, 4th edition, John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, 2010.

Bergman, T.L.; Incropera, F.P.; Dewitt, D.P. **Fundamentals of Heat and Mass Transfer**, 7th edition, John Wiley & Sons, United States of America, 2011.

Borgnakke, C.; Sonntag, R.E. **Fundamentals of Thermodynamics**, 8th edition, John Wiley & Sons, United States of America, 2013.

Blazek, J. **Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications**, Elsevier, Oxford, The United Kingdom, 2001.

Cassol, F.; Brittes, R.; França, F.H.R.; Ezekoye, O.A. Application of the weighted-sum-of-gray-gases model for media composed of arbitrary concentrations of H₂O, CO₂ and soot, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 79, p. 796–806, 2014.

Cassol, F.; Brittes, R.; Centeno, F.R.; Silva, C.V.; França, F.H.R. 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**, v. 37, p. 163–172, 2015.

Celik, I. RANS/LES/DES/DNS: the future prospects of turbulence modeling, **Journal of Fluids Engineering**, v. 127, n. 5, p. 829–830, 2005.

Centeno, F.R. **Modelagem da radiação térmica em chamas turbulentas da combustão de metano em ar**. 2014. 204 f. Tese – Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Centeno, F.R.; Silva, C.V.; França, F.H.R. The influence of gas radiation on the thermal behavior of a 2D axisymmetric turbulent non-premixed methane-air flame, **Energy Conversion and Management**, v. 79, p. 405–414, 2014.

Chapman, B.; Jost, G.; van der Pas, R. **Using OpenMP – Portable Shared Memory Parallel Programming**, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 2007.

Chase, M.W. NIST-JANAF Thermochemical Tables. Journal of Physical and Chemical Reference Data, Monograph No. 9., American Chemical Society, Woodbury, New York, 4th edition, 1998.

Chow, W.K. Application of the software Fire Dynamics Simulator in Simulating Retail Shop Fires, **Fire Safety Science**, v. 01, 2004.

Coelho, P.J. 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**, p. 705–710, 2002.

Coelho, P.J. Detailed numerical simulation of radiative transfer in a nonluminous turbulent jet diffusion flame, **Combustion and Flame**, v. 136, n. 4, p. 481–492, 2004.

Coelho, P.J. Numerical simulation of the interaction between turbulence and radiation in reactive flows, **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 33, p. 311–383, 2007.

Coelho, P.J. Turbulence-radiation interaction: from theory to application in numerical simulations, **Journal of Heat Transfer**, v. 134, n. 3, 2012.

Cox, G. On radiative heat transfer from turbulent flames, **Combustion Science and Technology**, v. 17, n. 1–2, p. 75–78, 1977.

Çengel, Y.A.; Boles, M.A. **Thermodynamics An Engineering Approach**, 8th edition, McGraw-Hill Education, New York, United States of America, 2015.

Deardorff, J.W. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers, **Journal of Fluid Mechanics**, v. 41, n. 2, p. 453–480, 1970.

Deardorff, J.W. Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model, **Boundary-Layer Meteorology**, v.18, n.4, p. 495–527.

Denison, M.K.; Webb B.W. A spectral line-based weighted sum-of-gray-gases model for arbitrary RTE solvers, **Journal of Heat Transfer**, v. 115, n. 4, p. 1004–1012, 1993.

Denison, M.K.; Webb B.W. The spectral line-based weighted-sum-of-gray-gases model in nonisothermal nonhomogeneous media, **Journal of Heat Transfer**, v. 117, n. 2, p. 359–365, 1995.

Deshmukh, K.V.; Haworth, D.C.; Modest, M.F. Direct numerical simulation of turbulence–radiation interactions in homogeneous nonpremixed combustion systems, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 31, p. 1641–1648, 2007.

Deshmukh, K.V.; Haworth, D.C.; Modest, M.F. Direct numerical simulation of turbulence–radiation interactions in a statistically one-dimensional nonpremixed system, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 109, p. 2391–2400, 2008.

Dorigon, L.J.; Duciak, G.; Brittes, R.; Cassol, F.; Galarça, M.; França, F.H.R. WSGG correlations based on HITEMP2010 for computation of thermal radiation in non-isothermal, non-homogeneous H₂O/CO₂ mixtures, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 64, p. 863–873, 2013.

Edwards, D.K.; Balakrishnan, A. Thermal radiation by combustion gases, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 16, n. 1, p. 25–40, 1973.

Fiveland, W.A. Discrete-ordinates solutions of the radiative transport equation for rectangular enclosures, **Journal of Heat Transfer**, v. 106, n. 4, p. 699–706, 1984.

Foster, P.J. The relation of time-mean transmission of turbulent flames to optical depth, **Journal of the Institute of Fuel**, v. 42, p. 179–182, 1969.

Freire, A.P.S.; Menut, P.P.M.; Su, J. **Turbulência, Volume 1**, ABCM – Associação Brasileira de Ciências Mecânicas, Rio de Janeiro, 2002.

Friedrich, R.; Arnal, M. Analysing turbulent backward-facing step flow with the lowpass-filtered Navier-Stokes equation, **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 35, p. 101–128, 1990.

Germano, M. Turbulent fluctuations coupled with the radiation field, **2nd Thermophysics and Heat Transfer Conference**, 1978.

Germano, M.; Piomelli, U.; Moin, P.; Cabot, W.H. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model, **Physics of Fluids A**, v. 3, n. 7, p. 1760–1765, 1991.

Goody, R.M. A statistical model for water-vapour absorption, **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v. 78, p. 165–169, 1952.

Gore, J.P.; Jeng, S.; Faeth, G.M. Spectral and total radiation properties of turbulent carbon monoxide/air diffusion flames, **AIAA Journal**, v. 25, n. 2, p. 339–345, 1987a.

Gore, J.P.; Jeng, S.; Faeth, G.M. Spectral and total radiation properties of turbulent hydrogen/air diffusion flames, **Journal of Heat Transfer**, v. 109, n. 1, p. 165–171, 1987b.

Gore, J.P.; Ip, U.; Sivathanu, Y.R. Coupled structure and radiation analysis of acetylene/air flames, **Journal of Heat Transfer**, v. 114, n. 2, p. 487–493, 1992.

Gropp, W.; Lusk, E.; Skjellum, A. **Using MPI – Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface**, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 2nd edition, 1999.

Gupta, A.; Modest, M.F.; Haworth, D.C. Large-eddy simulation of turbulence-radiation interactions in a turbulent planar channel flow, **Journal of Heat Transfer**, v. 131, n. 6, 2009.

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

Habibi, A.; Merci, B.; Roekaerts, D. The importance of turbulence-radiation interaction in RANS simulations of a turbulent non-premixed piloted laboratory-scale flame, **3rd European Combustion Meeting (ECM)**, 2007.

Hall, R.J.; Vranos A. Efficient calculations of gas radiation from turbulent flames, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 37, n. 17, p. 2745–2750, 1994.

Hartick, J.W.; Tacke, M.; Früchtel, G.; Hassel, E.P.; Janicka, J.; Interaction of turbulence and radiation in confined diffusion flames, **Symposium (International) on Combustion**, v. 26, n. 1, p. 75–82, 1996.

Heselton, K. **Boiler Operator's Handbook**, Fairmont Press, United States of America, 2005.

Hostikka, S. **Development of fire simulation models for radiative heat transfer and probabilistic risk assessment**, VTT Publication 683, VTT Technical Research Centre of Finland, Espoo, Finland, 2008.

Hottel, H.C.; Cohen, E.S. Radiant heat exchange in a gas-filled enclosure: allowance for nonuniformity of gas temperature, **AIChE Journal**, v. 4, n. 1, p. 3–14, 1958.

Hottel H.C.; Sarofim A.F. **Radiative Heat Transfer**, McGraw-Hill, New York, 1967.

Howell, J.R. The Monte Carlo method in radiative heat transfer, **Journal of Heat Transfer**, v. 120, n. 3, p. 547–560, 1998.

Jarrin, N. **Synthetic inflow boundary conditions for the numerical simulation of turbulence**. 2008. 258 f. Tese – University of Manchester.

Jeng, S.; Lai, M.; Faeth, G.M. Nonluminous radiation in turbulent buoyant axisymmetric flames, **Combustion Science and Technology**, v. 40, n. 1-4, p. 41–53, 1984.

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

Jones, W.P.; Whitelaw, J.H. Calculation methods for reacting turbulent flows: A review, **Combustion and Flame**, v. 48, p. 1–26, 1982.

Kabashnikov, V.P.; Kmit, G.I. Influence of turbulent fluctuations on thermal radiation, **Journal of Applied Spectroscopy**, v. 31, n. 2, p. 963–967.

Kaltenbach, H.J.; Fatica, M.; Mittal, R.; Lund, T.S.; Moin, P. Study of flow in a planar asymmetric diffuser using large-eddy simulation, **Journal of Fluid Mechanics**, v. 390, p. 151–185, 1999.

Kangwanpongpan, T.; França, F.H.R.; Silva, R.C.; Schneider, P.S.; Krautz, H.J. New correlations for the weighted-sum-of-gray-gases model in oxy-fuel conditions based on HITEMP 2010 database, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 55, p. 7419–7433, 2012.

Kim, S.H.; Huh, K.Y. Assessment of the finite-volume method and the discrete ordinate method for radiative transfer in a three-dimensional rectangular enclosure, **Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals**, v. 35, n. 1, p. 85–112, 1999.

Klein, M.; Sadiki, A.; Janicka, J. A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations, **Journal of Computational Physics**, v. 186, p. 652–665.

Kraichnan, R.H. Diffusion by a random velocity field, **Physics of Fluids**, v. 13, n. 1, p. 22–31, 1970.

Krebs, W.; Koch, R.; Bauer, H.J.; Kneer, R.; Wittig, S. Effect of turbulence on radiative heat transfer inside a model combustor, **Eurotherm Seminar no. 37 – Heat Transfer in Radiating and Combusting Systems 2**, p. 349–362, 1994.

Krebs, W.; Ganz, B.; Eigenmann, L.; Wittig, S. Effect of temperature and concentration fluctuations on radiative heat transfer in turbulent flames, **Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion**, p. 2763–2770, 1996.

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

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

Lee, S.; Lele, S.K.; Moin, P. Simulation of spatially evolving turbulence and the applicability of Taylor's hypothesis in compressible flow, **Physics of Fluids A**, v. 4, n. 7, p. 1521–1530, 1992.

Leonard, A. Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows, **Advances in Geophysics**, v. 18A, p. 237–248, 1974.

Lesieur, M. **Turbulence in Fluids**, 4th edition, Springer, Dordrecht, The Netherlands, 2008.

Lesieur, M.; Rogallo, R. Large-eddy simulation of passive scalar diffusion in isotropic turbulence, **Physics of Fluids A**, v. 1, n. 4, p. 718–722, 1989.

Li, B.Q. **Discontinuous Finite Elements in Fluid Dynamics and Heat Transfer**, Springer, London, 2006.

Li, G.; Modest, M.F. Application of composition PDF methods in the investigation of turbulence-radiation interactions, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 73, p. 461–472, 2002.

Li, G.; Modest, M.F. Importance of turbulence-radiation interactions in turbulent reacting flows, **Journal of Heat Transfer**, v. 125, n. 5, p. 831–838, 2003.

Li, G.; Modest, M.F. Numerical simulation of turbulence-radiation interactions in turbulent reacting flows, **Modelling and simulations of turbulent heat transfer**, v. 16, p. 77–109, 2005.

Libby, P.A. **Introduction to Turbulence**, Taylor & Francis, Washington, D.C., 1996.

Lilly, D.K. A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method, **Physics of Fluids A**, v. 4, n. 3, p. 633–635, 1992.

Liu, F.; Smallwood, G.J. An efficient approach for the implementation of the SNB based correlated-k method and its evaluation, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 84, n. 4, p. 465–475, 2004.

Lund, T.S.; Wu, X.; Squires, K.D. Generation of turbulent inflow data for spatially-developing boundary layer simulations, **Journal of Computational Physics**, v. 140, n. 2, p. 233–258.

Mahmood, S.; Radespiel, R. Zonal improved delayed detached-Eddy simulation of vortex generator jets at high Reynolds numbers for aeronautical flows, **CEAS Aeronautical Journal**, v. 4, n. 2, p. 203–222, 2013.

Malalasekera W.; Deiveegan, M.; Sadasivuni, S.; Ibrahim, S.S. Evaluation of turbulence/radiation effects using LES combustion simulation data, **Proceedings of Eurotherm 83 – Computational Thermal Radiation in Participating Media III**, pp. 221–233, 2009.

Maurente, A.; Vielmo, H.A.; França, F.H.R. Comparison of the standard weighted-sum-of-gray-gases with the absorption-line blackbody distribution function for the computation of radiative heat transfer in H₂O/CO₂ mixtures, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 109, n. 10, p. 1758–1770, 2008.

Mazumder, S.; Modest, M.F. A probability density function approach to modeling turbulence-radiation interactions in nonluminous flames, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 42, p. 971–991, 1999a.

Mazumder, S.; Modest, M.F. Turbulence-radiation interactions in nonreactive flow of combustion gases, **Journal of Heat Transfer**, v. 121, n. 3, p. 726–729, 1999b.

McDermott, R.; Forney, G.; McGrattan, K.; Mell, W. Fire Dynamics Simulator 6: Complex Geometry, Embedded Meshes, and Quality Assessment, **V European Conference on Computational Fluid Dynamics**, 2010.

McDermott, R. Quality assessment in the Fire Dynamics Simulator: a bridge to reliable simulations, **Proceedings of Fire and Evacuation Modeling Technical Conference**, 2011.

McGrattan, K.; Hostikka, S.; McDermott, R.; Floyd, J.; Weinschenk, C.; Overholt, K. **Fire Dynamics Simulator User's Guide**, 6th edition, NIST Special Publication 1019, National Institute of Standards and Technology, US Department of Commerce, United States of America, 2015a.

McGrattan, K.; Hostikka, S.; McDermott, R.; Floyd, J.; Weinschenk, C.; Overholt, K. **Fire Dynamics Simulator Technical Reference Guide Volume 1: Mathematical Model**, 6th edition, NIST Special Publication 1018-1, National Institute of Standards and Technology, US Department of Commerce, United States of America, 2015b.

McGrattan, K.; Hostikka, S.; McDermott, R.; Floyd, J.; Weinschenk, C.; Overholt, K. **Fire Dynamics Simulator Technical Reference Guide Volume 2: Verification**, 6th edition, NIST Special Publication 1018-2, National Institute of Standards and Technology, US Department of Commerce, United States of America, 2015c.

McGrattan, K.; Hostikka, S.; McDermott, R.; Floyd, J.; Weinschenk, C.; Overholt, K. **Fire Dynamics Simulator Technical Reference Guide Volume 3: Validation**, 6th edition, NIST Special Publication 1018-3, National Institute of Standards and Technology, US Department of Commerce, United States of America, 2015d.

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

Modest, M.F. **Radiative Heat Transfer**, 2nd edition, McGraw-Hill, New York, 2003.

Modest, M.F. Multiscale modeling of turbulence, radiation and combustion interactions in turbulent flames, **International Journal for Multiscale Computational Engineering**, v. 3, n. 1, p. 85–105, 2005.

Modest, M.F.; Zhang, H. The full-spectrum correlated-k distribution and its relationship to the weighted-sum-of-gray-gases method, **Proceedings of 2000 IMECE**, Pittsburgh, 2000.

Modest, M.F.; Zhang, H. The full-spectrum correlated-k distribution for thermal radiation from molecular gas-particulate mixtures, **Journal of Heat Transfer**, v. 124, n. 1, p. 30-38, 2002.

Moin, P.; Mahesh, K. Direct numerical simulation: a tool in turbulence research **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 30, p. 537–578, 1998.

Moin, P.; Kim J. Numerical investigation of turbulent channel flow, **Journal of Fluid Mechanics**, v. 118, p. 341–377, 1982.

Mossi, A.; Galarça, M.M.; Brittes, R.; Vielmo, H.A.; França, F.H.R. 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**, v. 43, n. 2, p. 112-119, 2012.

Möller, S.V.; Silvestrini, J.H. **Turbulência, Vol. 4**, ABCM, Rio de Janeiro, 2004.

Ničeno, B.; Dronkers, A.D.T.; Hanjalic, K. Turbulent heat transfer from a multi-layered wall-mounted cube matrix: a large eddy simulation, **International Journal of Heat and Fluid Flow**, v. 23, n. 2, p. 173–185, 2002.

Patankar, S.V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**, Hemisphere Publishing, New York, 1980.

Piomelli, U.; Liu, J. Large-eddy simulation of rotating channel flows using a localized dynamic model, **Physics of Fluids**, v. 7, p. 839–848, 1995.

Poinsot, T.; Veynante, D. **Theoretical and Numerical Combustion**, 2nd edition, R.T. Edwards, Philadelphia, United States of America, 2005.

Poitou, D.; Jorge, A.; El Hafi, M.; Cuenot, B. Analysis of the interaction between turbulent combustion and thermal radiation using unsteady coupled LES/DOM simulations, **Combustion and Flame**, v. 159, p. 1605–1618, 2012.

Pope, S.B. **Turbulent Flows**, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, 2000.

Pope, S.B. Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows, **New Journal of Physics**, v. 6, n. 35, p. 1–24, 2004.

Raithby, G.D.; Chui, E.H. A finite-volume method for predicting a radiant heat transfer in enclosures with participating media, **Journal of Heat Transfer**, v. 112, p. 415–423, 1990.

Rehm, R.G.; Baum, H.R. The Equations of Motion for Thermally Driven, Buoyant Flows, **Journal of Research of the National Bureau of Standards**, v. 83, p. 297–308, 1978.

Roache, P.J. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies, **Journal of Fluids Engineering**, v. 116, p. 405–413, 1994.

Roe, P.L. Characteristics-based schemes for the Euler equations, **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 18, p. 337–365, 1986.

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

Rothman, L.S.; Gordon, I.E.; Babikov, Y.; Barde, A.; Chris Benner, D.; Bernath, P.F.; Birk, M.; Bizzocchi, L.; Boudon, V.; Brown, L.R.; Campargue, A.; Chance, K.; Cohen, E.A.; Coudert, L.H.; Devi, V.M.; Drouin, B.J.; Fayt, A.; Flaud, J.-M.; Gamache, R.R.; Harrison, J.J.; Hartmann, J.-M.; Hill, C.; Hodges, J.T.; Jacquemart, D.; Jolly, A.; Lamouroux, J.; Le Roy, R.J.; Li, G.; Long, D.A.; Lyulin, O.M.; Mackie, C.J.; Massie, S.T.; Mikhailenko, S.; Müller, H.S.P.; Naumenko, O.V.; Nikitin, A.V.; Orphal, J.; Perevalov, V.; Perrin, A.; Polovtseva, E.R.; Richard, C.; Smith, M.A.H.; Starikova, E.; Sung, K.; Tashkun, S.; Tennyson, J.; Toon, G.C.; Tyuterev, V.I.; Wagner, G. The HITRAN2012 molecular spectroscopic database, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 130, p. 4–50, 2013.

Sagaut, P. **Large Eddy Simulation for Incompressible Flows: An Introduction**, 3rd edition, Springer, Berlin, Germany, 2006.

Santos, E.D. **Análise Numérica de Escoamentos Turbulentos Não Reativos com Transferência de Calor por Convecção e Radiação Térmica em Meios Participantes**. 2011. 208 f. Tese – Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Santos, E.D.; Isoldi, L.A.; Petry, A.P.; França, F.H.R. A numerical study of 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**, v. 36, n. 1, p. 207–219, 2014.

Schlichting, H. **Boundary-Layer Theory**, 7th edition, McGraw-Hill Book Company, United States of America, 1979.

Schlüter, J.U.; Pitsch, H.; Moin, P. Large eddy simulation inflow conditions for coupling with Reynolds-averaged flow solvers, **AIAA Journal**, v.42, n. 3, p. 478–484, 2004

Shen, T.; Huang, Y.; Chien, S. Using fire dynamics simulator (FDS) to reconstruct an arson fire scene, **Building and Environment**, v. 43, p. 1036–1045, 2008.

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

Silva, R.B. **Desenvolvimento de um novo modelo para integração espectral da RTE em problemas não homogêneos e não isotérmicos**. 2015. 166 f. Tese – Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Smagorinsky, J. General circulation experiments with the primitive equations. I: The basic experiment, **Monthly Weather Review**, v. 91, n. 3, p. 99–164, 1963.

Smith T.F; Shen Z.F.; Friedman, J.N. Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model, **Journal of Heat Transfer**, v. 104, p. 602–608, 1982.

Snegirev, A.Y. Statistical modeling of thermal radiation transfer in buoyant turbulent diffusion flames, **Combustion and Flame**, v. 136, p. 51–71, 2004.

Song, T.H.; Viskanta, R. Interaction of radiation with turbulence: application to a combustion system, **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 1, n. 1, pp. 56–62, 1987.

Soufiani, A. Temperature turbulence spectrum for high-temperature radiating gases, **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 5, n. 4, p. 489–494, 1991.

Soufiani, A.; Mignon, P.; Taine, J. Radiation-turbulence interaction in channel flows of infrared active gases, **Proceedings of the 9th International Heat Transfer Conference**, v. 6, 1990a.

Soufiani, A.; Mignon, P.; Taine, J. Radiation effects on turbulent heat transfer in channel flows of infrared active gases, **Radiation heat transfer: fundamentals and applications**, v. 137, 1990b.

Speziale, C.G. Turbulence modeling for time-dependent RANS and VLES: a review. **AIAA Journal**, v. 36, n. 2, p. 173–184, 1998.

Spiegel, E.A. The smoothing of temperature fluctuations by radiative transfer, **Astrophysical Journal**, v. 126, p. 202–207.

Sweet, R.A. Direct methods for the solution of Poisson's equation on a staggered grid, **Journal of Computational Physics**, v. 12, n. 3, p. 422–428, 1973.

Taine, J. A line-by-line calculation of low-resolution radiative properties of CO₂-CO-transparent nonisothermal gases mixtures up to 3000K, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 30, n. 4, p. 371–379, 1983.

Tan, E.; Foster, P.J. Radiation through a turbulent medium, **6th International Heat Transfer Conference**, p. 403–408. 1978.

Tennekes, H.; Lumley, J.L. **A First Course in Turbulence**, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1994.

Tessé, L.; Dupoirieux, F.; Taine, J. Monte Carlo modeling of radiative transfer in a turbulent sooty flame, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 47, p. 555–572, 2004.

Townsend, A.A. The effects of radiative transfer on turbulent flow of a stratified fluid, **Journal of Fluid Mechanics**, v. 4, n. 4, p. 361–375.

Turns, S.R. **An Introduction to Combustion: Concepts and Applications**, McGraw-Hill, 2nd edition, Singapore, 2000.

Velasco, G.E. **Estudo da interação turbulência-radiação através do método de simulação de grandes escalas para meios participantes**. 2014. 112 f. Dissertação – Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Versteeg, H.K.; Malalasekera, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**, 2nd edition, Prentice Hall, Harlow, England, 2007.

Viskanta, R.; Mengüç, M.P. Radiation heat transfer in combustion systems, **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 13, n. 2, p. 97–160, 1987.

Wang, A.; Modest, M.F. Photon Monte Carlo simulation for radiative transfer in gaseous media represented by discrete particle fields, **Journal of Heat Transfer**, v. 128, n. 10, p.

1041–1049, 2006.

Wang, A.; Modest, M.F. An adaptive emission model for Monte Carlo simulations in highly inhomogeneous media represented by stochastic particle fields, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 104, pp. 288–296, 2007.

Wang, M.; Moin, P. Computation of trailing-edge flow and noise using large-eddy simulation, **AIAA Journal**, v.38, n. 12, p. 2201–2209, 2000.

Wilcox, 1994. **Turbulence Modeling for CFD**, DCW Industries, La Cañada, California, United States of America, 1994.

Wu, Y.; Haworth, D.C.; Modest., M.F.; Cuenot, M. Direct numerical simulation of turbulence/radiation interaction in premixed combustion systems, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 30, p. 639–646, 2005.

Xin, Y.; Gore, J.P., McGrattan, K.B.; Rehm, R.G.; Baum, H.R. Fire dynamics simulation of a turbulent buoyant flame using a mixture-fraction-based combustion model, **Combustion and Flame**, v. 141, p. 329–335, 2005.

Yang, D.; Hu, L.H.; Jiang, Y.Q.; Huo, R.; Zhu, S.; Zhao, X.Y. Comparison of FDS predictions by different combustion models with measured data for enclosure fires, **Fire Safety Journal**, v. 45, p. 298–313, 2010.

APÊNDICE A – O intervalo de tempo para o cálculo das médias temporais

Conforme abordado na Seção 4.4, o cálculo de médias temporais a partir dos dados instantâneos obtidos com as simulações transientes é fundamental para a metodologia de avaliação dos efeitos do TRI aplicada neste trabalho. No entanto, o cálculo numérico LES acoplado com radiação térmica exige uma demanda computacional considerável, de modo que é desejável que cada caso seja processado somente por tempo suficiente de simulação para se conseguir estabelecer médias que sejam representativas do problema analisado.

Sob essa ótica, para determinar qual o menor intervalo necessário para o cálculo das médias temporais, dois casos são simulados, um utilizando dióxido de carbono como único constituinte do gás participante e, o outro, vapor de água. A geometria e as condições de contorno utilizadas em ambos os casos são as mesmas, de acordo com a Seção 4.1, e, para a intensidade de turbulência do escoamento na entrada, assume-se 20 %. Com o intuito de reduzir o tempo de processamento, emprega-se uma malha espacial relativamente grosseira, de 28 000 volumes (equivalente à discretização Q_x2 , da Tabela 4.3); 100 ângulos de controle são usados para a solução da RTE e adota-se um passo de tempo de 1×10^{-3} s.

O tempo total de simulação de cada caso é 100 s. Médias de temperatura são computadas para doze pontos dentro do domínio computacional, considerando diferentes intervalos de tempo. Desses pontos, dez deles são distribuídos dentro do domínio computacional em espaçamentos iguais ao longo de uma linha na direção x com coordenadas $(y, z) = (0,25 \text{ m}, 0,25 \text{ m})$, e os outros dois são contidos na linha $(x, z) = (2,2125 \text{ m}, 0,25 \text{ m})$ em $y = 0,125 \text{ m}$ e $y = 0,375 \text{ m}$.

A.1 Limite inferior para o cálculo das médias temporais

Por se tratar de um caso transiente em que o escoamento se desenvolve dentro do domínio computacional, não é possível (e tampouco é esperado) que os instantes iniciais de simulação, que correspondem à entrada do escoamento no duto e ao início da troca térmica, sejam representativos do problema geral e devam ser incluídos no cálculo das médias temporais. De fato, conforme pode ser visto nas Figuras A.1a e A.1b, que mostram a evolução instantânea da temperatura em alguns pontos, para o vapor de água e para o dióxido de carbono, existe um certo período de tempo inicial para o qual a variação dos valores de temperatura é muito maior que aquela imposta pelas flutuações causadas pela turbulência.

Para determinar a partir de quanto tempo após o início das simulações as médias temporais devem ser computadas, médias são calculadas em intervalos não cumulativos de 1 s. Ou seja, usando-se os dados instantâneos obtidos das simulações transientes, são computadas médias de $t = 0 \text{ s}$ a $t = 1 \text{ s}$ (assumindo-se $t = 0 \text{ s}$ o tempo de início de todas as simulações), de $t = 1 \text{ s}$ a $t = 2 \text{ s}$, e assim sucessivamente. Esse cálculo é feito até o intervalo 19 s–20 s.

Então, diferenças percentuais são calculadas entre cada par de intervalos sucessivos – por exemplo, entre as médias calculadas de 0 s a 1 s e de 1 s a 2 s. A Figura A.2 mostra os valores

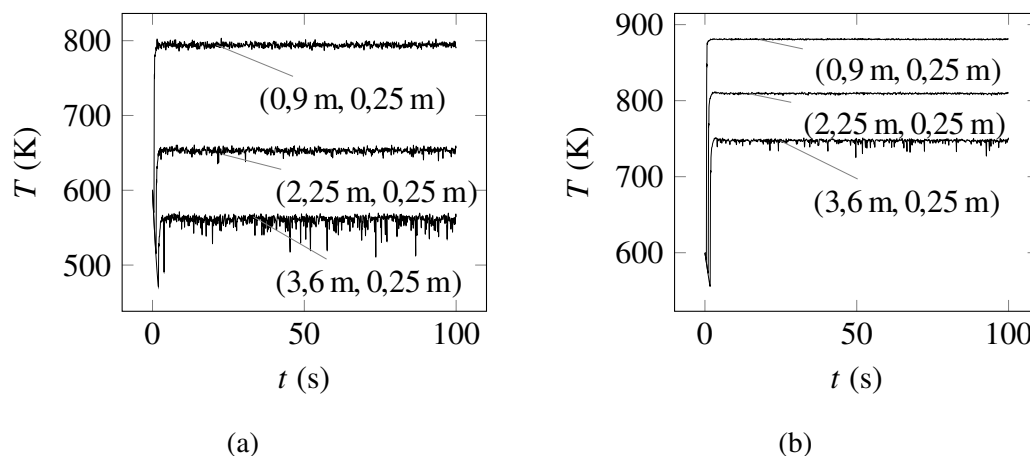


Figura A.1 – Resultados instantâneos de temperatura em alguns pontos no interior do domínio de cálculo para o H_2O (a) e para o CO_2 (b).

máximo e médio das diferenças percentuais entre cada par de intervalos, tanto para o H_2O como para o CO_2 . Esses valores máximo e médio correspondem, respectivamente, à máxima diferença computada no conjunto de pontos avaliados e à média aritmética das diferenças em todos os doze pontos, para cada intervalo.

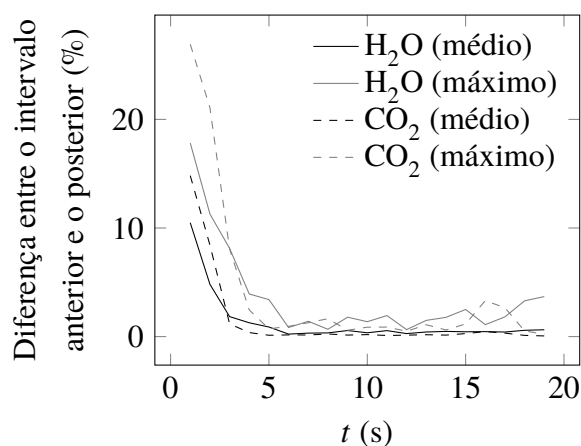


Figura A.2 – Diferença percentual entre médias temporais de temperatura calculadas entre dois intervalos consecutivos de 1 s de duração.

Na Figura A.2, percebe-se, assim como na Figura A.1, que o perfil de temperatura até aproximadamente 5 s de cálculo tem um comportamento significativamente distinto do restante da simulação. Portanto, adota-se $t = 5$ s como o limite inferior para o início dos cálculos das médias temporais em todos os casos desta dissertação.

A.2 Limite superior para o cálculo das médias temporais

Uma vez determinado o limite inferior para o cálculo das médias temporais, novas médias são computadas, a partir das séries de dados instantâneos de temperatura, por diferentes períodos de tempo P . Isso é feito com o objetivo de avaliar quanto tempo de simulação é suficiente para a obtenção de estatísticas que representem corretamente o problema estudado.

Todos os períodos iniciam-se após 5 s de simulação e são cumulativos, sendo o incremento entre eles também igual a 5 s. Ou seja, o primeiro período tem duração de 5 s e compreende os instantes entre $t = 5$ s e $t = 10$ s de simulação; o segundo período, de 10 s, contém o intervalo de $t = 5$ s a $t = 15$ s; e assim por diante, até o último período completar os 100 s de simulação. Então, seguindo-se a mesma metodologia utilizada na subseção anterior, as diferenças percentuais entre dois períodos sucessivos são calculadas em cada ponto. Seus valores máximos e médios, para o vapor de água e para o dióxido de carbono, são expostos na Figura A.3.

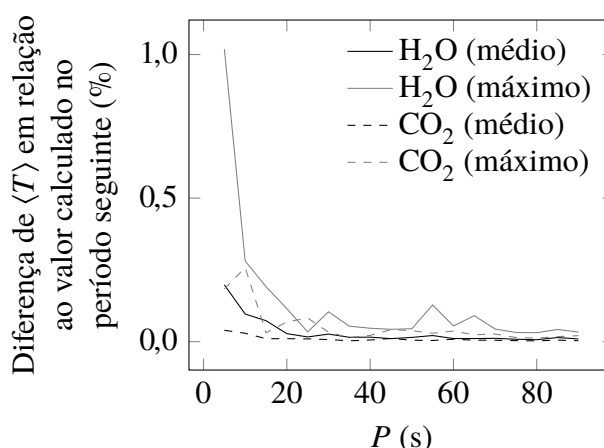


Figura A.3 – Diferença percentual entre médias de temperatura calculadas em períodos de tempo distintos. Em todos os casos, médias tomadas a partir dos 5 s de simulação.

Dessa figura, observa-se que as médias temporais avaliadas com períodos muito pequenos apresentam maiores desvios, provavelmente pelo fato de que, nesses intervalos, a simulação não se desenvolveu por tempo suficiente para estabelecer um regime estatisticamente permanente. Porém, após essa faixa inicial em que $\langle T \rangle$ possui um comportamento irregular, os valores das médias passam a ser virtualmente independentes do aumento do intervalo adotado para os seus cálculos.

Tendo em vista que, nas simulações dos casos principais deste trabalho, são consideradas intensidades de turbulência nulas e próximas de zero, variações de cerca de 1 % no valor médio da temperatura – como observado para $P = 5$ s – não são satisfatórias. Dessa forma, opta-se pelo período de 15 s para o cálculo das médias temporais de temperatura (e das demais grandezas de

interesse) em todas as simulações do presente trabalho. Na análise realizada, a diferença relativa máxima de $\langle T \rangle$ computada com $P = 15$ s e com $P = 20$ s é de 0,25 % (o valor encontrado para o CO_2 é ainda menor), e a diferença média é de 0,11 %. Além disso, o período de 15 s para a avaliação das médias, somado ao limite inferior de 5 s determinado anteriormente, resulta em um tempo final de simulação de 20 s, uma quantidade razoável considerando-se o recurso computacional disponível.

Portanto, condensando-se os resultados das análises conduzidas, conclui-se que valores médios satisfatórios podem ser obtidos após quinze segundos de tomadas de dados. Ainda, devido ao tempo requerido para os desenvolvimentos térmico e hidrodinâmico do problema, dados correspondentes aos primeiros 5 s de simulação não devem ser considerados na avaliação das médias. Por essas razões, todas as simulações conduzidas nesta dissertação, exceto quando expressamente indicado, têm duração total de 20 s; deste tempo, a computação das médias de todas as grandezas relevantes é feita sobre os dados instantâneos correspondentes aos 15 s finais dos cálculos numéricos.

APÊNDICE B – Informações sobre os casos simulados

Neste apêndice, são condensadas as informações relevantes sobre todas as simulações numéricas realizadas no presente trabalho. As exceções são os cálculos conduzidos para a análise de qualidade da discretização, descritos na Seção 4.3, e para a determinação dos limites dos períodos para a computação das médias temporais, abordados no Apêndice A.

Com esse fim, a Tabela B.1, mostrada nas páginas seguintes, fornece dados sobre cada simulação. Esses dados incluem os parâmetros de cada caso (isto é, intensidade de turbulência do escoamento na entrada do domínio, espécie química constituinte do fluido de trabalho e modelo espectral empregado), a malha empregada – de acordo com a Tabela 4.2 –, e os valores máximos da média temporal do critério MTR e do número de Courant modificado máximo, ambas quantidades importantes para análises de estabilidade numérica e de qualidade de malha, conforme discutido na Seção 4.3.4.

Além disso, a Tabela B.1 também mostra os resultados de cada etapa do processo iterativo, descrito na subseção 4.1.4, para a determinação da temperatura de saída do domínio computacional. Ou seja, são apresentados os valores da temperatura do reservatório externo, T_{∞} , e da temperatura média de mistura no plano de volumes finitos imediatamente anterior à seção de saída, T_{med} ; a diferença percentual relativa ζ entre esses valores; e a situação da convergência do cálculo (isto é, se o cálculo convergiu ou não naquela etapa, seguindo-se o critério estabelecido de $\zeta \leq 0,1\%$). Evidentemente, esses dados são fornecidos apenas para as simulações que fazem parte do processo iterativo que leva à obtenção de T_{∞} .

Por fim, a Tabela B.1 informa ainda, na coluna denominada “função”, a razão pela qual cada simulação é submetida. Para isso, utilizam-se as letras “(a)”, “(b)”, “(c)”, “(d)” e “(e)”, em que cada letra corresponde à determinada função:

- (a) Etapa do processo iterativo para a determinação da temperatura do reservatório externo na saída do domínio de cálculo;
- (b) Cálculo da solução que considera os efeitos da interação turbulência-radiação (solução “com TRI”);
- (c) Cálculo da solução que negligencia os efeitos da interação turbulência-radiação, inicializado apenas com o campo médio temporal da temperatura (solução “sem TRI simples”);
- (d) Cálculo da solução que negligencia os efeitos da interação turbulência-radiação, inicializado com os campos médios temporais da temperatura e da intensidade de radiação (solução “sem TRI alternativa”);
- (e) Cálculo da solução “sem TRI alternativa” com a aplicação do fator de correção ϱ , discutido na seção 5.4.

Nas notas da Tabela B.1, fica evidente que, em certos casos, não é possível adotar o passo de tempo escolhido da análise da qualidade da discretização temporal, subseção 4.3.2. Em geral, para intensidades de turbulência nulas, tem-se de reduzir o incremento temporal das simulações, caso contrário o cálculo numérico diverge. A razão para isso não foi investigada no presente

trabalho, mas é por esse motivo que não são mostrados, na Tabela B.1, resultados das simulações com o vapor de água e o modelo WSGG para $IT = 0\%$. Nestes casos, o passo de tempo tem de ser tão refinado que o tempo total exigido para o processamento de cada cálculo se torna proibitivo dentro do contexto dos recursos computacionais disponíveis.

Tabela B.1 – Denominação dos casos

Nº	Parâmetros		Malha	Função	Determinação da temperatura de saída			$\langle MTR \rangle_{max}$	C_{max}		
	IT (%)	Espécie			Modelo	T_{∞} (K)	T_{med} (K)			ζ (%)	Convergência
1	5	H ₂ O	WSGG	T1	(a)	733,33	703,22	4,283	Não convergido	0,150	0,086
2	5	H ₂ O	WSGG	T2	(a)	703,22	701,80	0,201	Não convergido	0,150	0,100
3	5	H ₂ O	WSGG	T3	(a), (b)	701,80	702,04	0,033	Convergido	0,150	0,084
4	5	H ₂ O	WSGG	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
5	5	H ₂ O	WSGG	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
6	5	H ₂ O	WSGG	T3	(e)	-	-	-	-	-	-
7	10	H ₂ O	WSGG	T1	(a)	733,33	702,01	4,462	Não convergido	0,096	0,088
8	10	H ₂ O	WSGG	T2	(a)	702,01	700,38	0,233	Não convergido	0,101	0,110
9	10	H ₂ O	WSGG	T3	(a)	700,38	699,01	0,195	Não convergido	0,105	0,088
10	10	H ₂ O	WSGG	T3	(a), (b)	699,01	699,08	0,010	Convergido	0,105	0,092
11	10	H ₂ O	WSGG	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
12	10	H ₂ O	WSGG	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
13	10	H ₂ O	WSGG	T3	(e)	-	-	-	-	-	-
14	15	H ₂ O	WSGG	T1	(a)	733,33	700,96	4,618	Não convergido	0,076	0,110
15	15	H ₂ O	WSGG	T2	(a)	700,96	697,78	0,457	Não convergido	0,072	0,110

Tabela B.1 – Denominação dos casos

Nº	Parâmetros		Malha	Função	Determinação da temperatura de saída			$\langle MTR \rangle_{max}$	C_{max}		
	IT (%)	Espécie			Modelo	T_{∞} (K)	T_{med} (K)			ζ (%)	Convergência
16	15	H ₂ O	WSGG	T3	(a)	697,78	695,65	0,305	Não convergido	0,093	0,110
17	15	H ₂ O	WSGG	T3	(a), (b)	695,65	696,04	0,056	Convergido	0,094	0,120
18	15	H ₂ O	WSGG	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
19	15	H ₂ O	WSGG	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
20	15	H ₂ O	WSGG	T3	(e)	-	-	-	-	-	-
21	20	H ₂ O	WSGG	T1	(a)	733,33	699,37	4,856	Não convergido	0,077	0,100
22	20	H ₂ O	WSGG	T2	(a)	699,37	696,03	0,479	Não convergido	0,057	0,120
23	20	H ₂ O	WSGG	T3	(a)	696,03	693,33	0,389	Não convergido	0,079	0,160
24	20	H ₂ O	WSGG	T3	(a), (b)	693,33	693,08	0,037	Convergido	0,079	0,160
25	20	H ₂ O	WSGG	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
26	20	H ₂ O	WSGG	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
27	20	H ₂ O	WSGG	T3	(e)	-	-	-	-	-	-
28	0	CO ₂	WSGG	T1	(a)	733,33	751,87	2,466	Não convergido	0,300	0,028
29	0	CO ₂	WSGG	T2	(a)	751,87	745,44	0,863	Não convergido	0,300	0,039
30	0	CO ₂	WSGG	T3	(a)	745,44	763,27	2,336	Não convergido	0,455	0,018 ⁽²⁾

Tabela B.1 – Denominação dos casos

Nº	Parâmetros		Malha	Função	Determinação da temperatura de saída			$\langle MTR \rangle_{max}$	C_{max}		
	IT (%)	Espécie			Modelo	T_{∞} (K)	T_{med} (K)			ζ (%)	Convergência
31	0	CO ₂	WSGG	T3	(a), (b)	763,27	763,43	0,021	Convergi	0,455	0,017 ⁽²⁾
32	0	CO ₂	WSGG	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
33	0	CO ₂	WSGG	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
34	0	CO ₂	WSGG	T3	(e)	-	-	-	-	-	-
35	5	CO ₂	WSGG	T1	(a)	733,33	744,29	1,472	Não convergi	0,061	0,036
36	5	CO ₂	WSGG	T2	(a)	744,29	743,00	0,174	Não convergi	0,051	0,041
37	5	CO ₂	WSGG	T3	(a)	743,00	752,80	1,302	Não convergi	0,038	0,035
38	5	CO ₂	WSGG	T3	(a), (b)	752,80	753,00	0,026	Convergi	0,038	0,032
39	5	CO ₂	WSGG	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
40	5	CO ₂	WSGG	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
41	5	CO ₂	WSGG	T3	(e)	-	-	-	-	-	-
42	10	CO ₂	WSGG	T1	(a)	733,33	737,51	0,566	Não convergi	0,056	0,035
43	10	CO ₂	WSGG	T2	(a)	737,51	737,95	0,060	Convergi	0,052	0,042
44	10	CO ₂	WSGG	T3	(a)	737,95	744,69	0,905	Não convergi	0,039	0,039
45	10	CO ₂	WSGG	T3	(a), (b)	744,69	744,87	0,023	Convergi	0,039	0,036

Tabela B.1 – Denominação dos casos

Nº	Parâmetros		Malha	Função	Determinação da temperatura de saída			$\langle MTR \rangle_{max}$	C_{max}	
	IT (%)	Espécie			Modelo	T_{∞} (K)	T_{med} (K)			ζ (%)
46	10	CO ₂	WSGG	T3	(c)	-	-	-	-	
47	10	CO ₂	WSGG	T3	(d)	-	-	-	-	
48	10	CO ₂	WSGG	T3	(e)	-	-	-	-	
49	15	CO ₂	WSGG	T1	(a)	733,33	732,34	0,135	Não convergido	0,037
50	15	CO ₂	WSGG	T2	(a)	732,34	732,41	0,009	Convergado	0,045
51	15	CO ₂	WSGG	T3	(a)	732,41	739,02	0,895	Não convergido	0,045
52	15	CO ₂	WSGG	T3	(a), (b)	739,02	739,10	0,011	Convergado	0,045
53	15	CO ₂	WSGG	T3	(c)	-	-	-	-	-
54	15	CO ₂	WSGG	T3	(d)	-	-	-	-	-
55	15	CO ₂	WSGG	T3	(e)	-	-	-	-	-
56	20	CO ₂	WSGG	T1	(a)	733,33	727,53	0,797	Não convergido	0,042
57	20	CO ₂	WSGG	T2	(a)	727,53	727,11	0,059	Convergado	0,051
58	20	CO ₂	WSGG	T3	(a)	727,11	734,00	0,939	Não convergido	0,059
59	20	CO ₂	WSGG	T3	(a), (b)	734,00	734,07	0,010	Convergado	0,060
60	20	CO ₂	WSGG	T3	(c)	-	-	-	-	-

Tabela B.1 – Denominação dos casos

Nº	Parâmetros		Malha	Função	Determinação da temperatura de saída			$\langle MTR \rangle_{max}$	C_{max}		
	IT (%)	Espécie			Modelo	T_{∞} (K)	T_{med} (K)			ζ (%)	Convergência
61	20	CO ₂	WSGG	T3	(d)	-	-	-	-		
62	20	CO ₂	WSGG	T3	(e)	-	-	-	-		
63	0	H ₂ O	GG _k	T1	(a)	733,33	584,69	25,422	Não convergido	0,500	0,038 ⁽¹⁾
64	0	H ₂ O	GG _k	T2	(a)	584,69	577,19	1,299	Não convergido	0,500	0,045 ⁽¹⁾
65	0	H ₂ O	GG _k	T3	(a)	577,19	573,80	0,592	Não convergido	0,500	0,080 ⁽³⁾
66	0	H ₂ O	GG _k	T3	(a), (b)	573,80	573,65	0,025	Convergido	0,500	0,082 ⁽³⁾
67	0	H ₂ O	GG _k	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
68	0	H ₂ O	GG _k	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
69	5	H ₂ O	GG _k	T1	(a)	733,33	584,83	25,392	Não convergido	0,200	0,084
70	5	H ₂ O	GG _k	T2	(a)	584,83	576,99	1,360	Não convergido	0,200	0,096
71	5	H ₂ O	GG _k	T3	(a)	576,99	573,52	0,604	Não convergido	0,200	0,076
72	5	H ₂ O	GG _k	T3	(a), (b)	573,52	573,45	0,012	Convergido	0,200	0,077
73	5	H ₂ O	GG _k	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
74	5	H ₂ O	GG _k	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
75	10	H ₂ O	GG _k	T1	(a)	733,33	584,54	25,455	Não convergido	0,100	0,081

Tabela B.1 – Denominação dos casos

N°	Parâmetros		Malha	Função	Determinação da temperatura de saída			$\langle MTR \rangle_{max}$	C_{max}		
	IT (%)	Espécie			Modelo	T_{∞} (K)	T_{med} (K)			ζ (%)	Convergência
76	10	H ₂ O	GG _k	T2	(a)	584,54	576,01	1,481	Não convergido	0,100	0,100
77	10	H ₂ O	GG _k	T3	(a)	576,01	572,39	0,633	Não convergido	0,155	0,086
78	10	H ₂ O	GG _k	T3	(a), (b)	572,39	572,32	0,012	Convergido	0,155	0,084
79	10	H ₂ O	GG _k	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
80	10	H ₂ O	GG _k	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
81	15	H ₂ O	GG _k	T1	(a)	733,33	584,27	25,512	Não convergido	0,082	0,093
82	15	H ₂ O	GG _k	T2	(a)	584,27	575,20	1,577	Não convergido	0,087	0,110
83	15	H ₂ O	GG _k	T3	(a)	575,20	570,81	0,770	Não convergido	0,105	0,120
84	15	H ₂ O	GG _k	T3	(a), (b)	570,81	570,76	0,008	Convergido	0,105	0,120
85	15	H ₂ O	GG _k	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
86	15	H ₂ O	GG _k	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
87	20	H ₂ O	GG _k	T1	(a)	733,33	582,96	25,795	Não convergido	0,082	0,110
88	20	H ₂ O	GG _k	T2	(a)	582,96	574,02	1,557	Não convergido	0,072	0,120
89	20	H ₂ O	GG _k	T3	(a)	574,02	569,76	0,747	Não convergido	0,088	0,150
90	20	H ₂ O	GG _k	T3	(a), (b)	569,76	569,52	0,043	Convergido	0,088	0,150

Tabela B.1 – Denominação dos casos

Nº	Parâmetros		Malha	Função	Determinação da temperatura de saída			$\langle MTR \rangle_{max}$	C_{max}		
	IT (%)	Espécie			Modelo	T_{∞} (K)	T_{med} (K)			ζ (%)	Convergência
91	20	H ₂ O	GG _k	T3	(c)	-	-	-	-		
92	20	H ₂ O	GG _k	T3	(d)	-	-	-	-		
93	0	CO ₂	GG _k	T1	(a)	733,33	537,84	36,348	Não convergido	0,150	0,073
94	0	CO ₂	GG _k	T2	(a)	537,84	512,81	4,882	Não convergido	0,450	0,071
95	0	CO ₂	GG _k	T3	(a)	512,81	512,26	0,107	Não convergido	0,455	0,060
96	0	CO ₂	GG _k	T3	(a), (b)	512,26	512,22	0,007	Convergido	0,455	0,064
97	0	CO ₂	GG _k	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
98	0	CO ₂	GG _k	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
99	5	CO ₂	GG _k	T1	(a)	733,33	535,66	36,903	Não convergido	0,061	0,073
100	5	CO ₂	GG _k	T2	(a)	535,66	511,10	4,804	Não convergido	0,150	0,071
101	5	CO ₂	GG _k	T3	(a)	511,10	510,50	0,119	Não convergido	0,155	0,064
102	5	CO ₂	GG _k	T3	(a), (b)	510,50	510,54	0,009	Convergido	0,155	0,064
103	5	CO ₂	GG _k	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
104	5	CO ₂	GG _k	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
105	10	CO ₂	GG _k	T1	(a)	733,33	531,86	37,880	Não convergido	0,061	0,073

Tabela B.1 – Denominação dos casos

Nº	Parâmetros		Malha	Função	Determinação da temperatura de saída			$\langle MTR \rangle_{max}$	C_{max}		
	IT (%)	Espécie			Modelo	T_{∞} (K)	T_{med} (K)			ζ (%)	Convergência
106	10	CO ₂	GG _k	T2	(a)	531,86	507,52	4,796	Não convergido	0,057	0,071
107	10	CO ₂	GG _k	T3	(a), (b)	507,52	507,34	0,036	Convergido	0,073	0,065
108	10	CO ₂	GG _k	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
109	10	CO ₂	GG _k	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
110	15	CO ₂	GG _k	T1	(a)	733,33	530,09	38,343	Não convergido	0,061	0,073
111	15	CO ₂	GG _k	T2	(a)	530,09	505,49	4,865	Não convergido	0,047	0,071
112	15	CO	GG _k	T3	(a), (b)	505,49	505,02	0,094	Convergido	0,049	0,065
113	15	CO ₂	GG _k	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
114	15	CO ₂	GG _k	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
115	20	CO ₂	GG _k	T1	(a)	733,33	528,13	38,856	Não convergido	0,057	0,073
116	20	CO	GG _k	T2	(a)	528,13	504,37	4,710	Não convergido	0,047	0,072
117	20	CO ₂	GG _k	T3	(a)	504,37	503,64	0,146	Não convergido	0,044	0,065
118	20	CO ₂	GG _k	T3	(a), (b)	503,64	503,58	0,010	Convergido	0,044	0,065
119	20	CO ₂	GG _k	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
120	20	CO ₂	GG _k	T3	(d)	-	-	-	-	-	-

Tabela B.1 – Denominação dos casos

Nº	Parâmetros		Malha	Função	Determinação da temperatura de saída			$\langle MTR \rangle_{max}$	C_{max}			
	IT (%)	Espécie			Modelo	T_{∞} (K)	T_{med} (K)			ζ (%)	Convergência	
121	0	H ₂ O	GG _{k(T)}	T1	(a)	733,33	591,38	24,005	24,005	Não convergido	0,500	0,038 ⁽¹⁾
122	0	H ₂ O	GG _{k(T)}	T2	(a)	591,38	580,28	1,913	1,913	Não convergido	0,500	0,024 ⁽²⁾
123	0	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(a)	580,28	579,41	0,149	0,149	Não convergido	0,500	0,180 ⁽³⁾
124	0	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(a), (b)	579,41	579,44	0,005	0,005	Convergiu	0,500	0,100 ⁽³⁾
125	0	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(c)	-	-	-	-	-	-	-
126	0	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(d)	-	-	-	-	-	-	-
127	5	H ₂ O	GG _{k(T)}	T1	(a)	733,33	590,48	24,194	24,194	Não convergido	0,200	0,076
128	5	H ₂ O	GG _{k(T)}	T2	(a)	590,48	581,22	1,592	1,592	Não convergido	0,200	0,093
129	5	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(a)	581,22	578,62	0,451	0,451	Não convergido	0,200	0,460
130	5	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(a), (b)	578,62	578,57	0,008	0,008	Convergiu	0,200	0,140
131	5	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(c)	-	-	-	-	-	-	-
132	5	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(d)	-	-	-	-	-	-	-
133	10	H ₂ O	GG _{k(T)}	T1	(a)	733,33	590,07	24,279	24,279	Não convergido	0,100	0,081
134	10	H ₂ O	GG _{k(T)}	T2	(a)	590,07	579,64	1,799	1,799	Não convergido	0,100	-
135	10	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(a)	579,64	576,75	0,500	0,500	Não convergido	0,155	0,160

Tabela B.1 – Denominação dos casos

Nº	Parâmetros		Malha	Função	Determinação da temperatura de saída			$\langle MTR \rangle_{max}$	C_{max}		
	IT (%)	Espécie			Modelo	T_{∞} (K)	T_{med} (K)			ζ (%)	Convergência
136	10	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(a), (b)	576,75	576,81	0,010	Convergi-do	0,155	0,190
137	10	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
138	10	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
139	15	H ₂ O	GG _{k(T)}	T1	(a)	733,33	588,60	24,589	Não convergi-do	0,081	0,093
140	15	H ₂ O	GG _{k(T)}	T2	(a)	588,60	578,64	1,722	Não convergi-do	0,087	-
141	15	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(a)	578,64	574,53	0,715	Não convergi-do	0,105	0,140
142	15	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(a), (b)	574,53	574,74	0,036	Convergi-do	0,105	0,120
143	15	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
144	15	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
145	20	H ₂ O	GG _{k(T)}	T1	(a)	733,33	587,11	24,906	Não convergi-do	0,087	0,110
146	20	H ₂ O	GG _{k(T)}	T2	(a)	587,11	577,12	1,731	Não convergi-do	0,072	0,120
147	20	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(a)	577,12	573,09	0,702	Não convergi-do	0,089	0,160
148	20	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(a), (b)	573,09	572,80	0,052	Convergi-do	0,089	0,160
149	20	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
150	20	H ₂ O	GG _{k(T)}	T3	(d)	-	-	-	-	-	-

Tabela B.1 – Denominação dos casos

Nº	Parâmetros		Malha	Função	Determinação da temperatura de saída			$\langle MTR \rangle_{max}$	C_{max}		
	IT (%)	Espécie			Modelo	T_{∞} (K)	T_{med} (K)			ζ (%)	Convergência
151	0	CO ₂	GG _{k(T)}	T1	(a)	733,33	560,30	30,882	Não convergido	0,150	0,076
152	0	CO ₂	GG _{k(T)}	T2	(a)	560,30	538,46	4,056	Não convergido	0,450	0,071
153	0	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(a)	538,46	544,83	1,168	Não convergido	0,455	0,064
154	0	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(a), (b)	544,83	545,06	0,042	Convergido	0,455	0,063
155	0	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
156	0	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
157	5	CO ₂	GG _{k(T)}	T1	(a)	733,33	557,09	31,635	Não convergido	0,061	0,076
158	5	CO ₂	GG _{k(T)}	T2	(a)	557,09	536,03	3,930	Não convergido	0,150	0,071
159	5	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(a)	536,03	541,64	1,036	Não convergido	0,105	0,064
160	5	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(a), (b)	541,64	541,74	0,018	Convergido	0,105	0,063
161	5	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
162	5	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
163	10	CO ₂	GG _{k(T)}	T1	(a)	733,33	553,54	32,480	Não convergido	0,061	0,076
164	10	CO ₂	GG _{k(T)}	T2	(a)	553,54	532,89	3,874	Não convergido	0,052	0,071
165	10	CO ₂	GG _{k(T)}	T2	(a)	532,89	537,31	0,821	Não convergido	0,064	0,064

Tabela B.1 – Denominação dos casos

Nº	Parâmetros		Malha	Função	Determinação da temperatura de saída			$\langle MTR \rangle_{max}$	C_{max}		
	IT (%)	Espécie			Modelo	T_{∞} (K)	T_{med} (K)			ζ (%)	Convergência
166	10	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(a)	537,31	538,00	0,128	Não convergido	0,064	0,064
167	10	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(a), (b)	538,00	537,52	0,089	Convergido	0,064	0,064
168	10	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
169	10	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
170	15	CO ₂	GG _{k(T)}	T1	(a)	733,33	551,36	33,004	Não convergido	0,062	0,076
171	15	CO ₂	GG _{k(T)}	T2	(a)	551,36	529,73	4,082	Não convergido	0,047	0,071
172	15	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(a)	529,73	534,59	0,907	Não convergido	0,044	0,064
173	15	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(a), (b)	534,59	534,86	0,051	Convergido	0,044	0,064
174	15	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(c)	-	-	-	-	-	-
175	15	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(d)	-	-	-	-	-	-
176	20	CO ₂	GG _{k(T)}	T1	(a)	733,33	549,15	33,540	Não convergido	0,057	0,076
177	20	CO ₂	GG _{k(T)}	T2	(a)	549,15	527,99	4,008	Não convergido	0,047	0,071
178	20	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(a)	527,99	532,82	0,907	Não convergido	0,039	0,064
179	20	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(a), (b)	532,82	533,02	0,038	Convergido	0,039	0,064
180	20	CO ₂	GG _{k(T)}	T3	(c)	-	-	-	-	-	-

Tabela B.1 – Denominação dos casos

N°	Parâmetros		Malha	Função	Determinação da temperatura de saída					
	IT (%)	Espécie			Modelo	T_{∞} (K)	T_{med} (K)	ζ (%)	Convergência	$\langle MTR \rangle_{max}$
181	20	CO ₂	GG _{$\kappa(T)$}	T3	(d)	-	-	-	-	-

⁽¹⁾ Novo passo de tempo adotado para a simulação, $\delta t = 0,001$ s, devido à divergência do cálculo numérico.

⁽²⁾ Novo passo de tempo adotado para a simulação, $\delta t = 0,0005$ s, devido à divergência do cálculo numérico.

⁽³⁾ Novo passo de tempo adotado para a simulação, $\delta t = 0,00025$ s, devido à divergência do cálculo numérico.